

05;11,12

О механизмах сглаживания микрорельефа поверхности мишени при облучении интенсивным потоком заряженных частиц

© В.С. Красников, А.Я. Лейви, А.Е. Майер, А.П. Яловец

Южно-Уральский государственный университет,
454080 Челябинск, Россия
e-mail: yal@csu.ru; mayer@csu.ru

(Поступило в Редакцию 19 июня 2006 г.)

Предложены физические механизмы и математическая модель сглаживания микрорельефа облучаемой поверхности. Сглаживание обусловлено упруго-пластическим деформированием вещества до момента плавления и динамикой границы мишени под действием сил поверхностного натяжения, вязкости и инерции после плавления поверхностного слоя облучаемой мишени. Результаты численного моделирования качественно и количественно согласуются с экспериментальными данными. Предложенная математическая модель может быть использована для прогнозирования изменения микрорельефа облучаемой поверхности и выбора режимов облучения при решении задач радиационных технологий.

PACS: 61.80.Az, 81.65.-b

Введение

Обработка интенсивными потоками ускоренных заряженных частиц является одним из перспективных методов улучшения качества поверхностного слоя конструкционных материалов. Радиационные технологии обладают рядом существенных преимуществ перед традиционно используемыми в машиностроении методами: возможность обработки высокоточных деталей сложной формы, малое время обработки, простота автоматизации процесса.

Быстрый ввод энергии пучка в вещество мишени вызывает протекание в нем интенсивных тепловых и деформационных процессов, приводящих к изменению структуры и фазового состава материала мишени. При этом может происходить увеличение прочности, износостойкости и эрозионной устойчивости материала [1]. Кроме того, изменяется микрорельеф облучаемой поверхности. При обработке металлических мишеней электронными [2] и ионными [3,4] пучками на облученной поверхности наблюдается образование микрократеров, размеры и количество которых зависят от режима облучения и начального состояния поверхности. Как было показано в работах [5,6], при определенных режимах облучения может происходить сглаживание рельефа поверхности мишени, что использовалось авторами для улучшения ее качества.

В работах [7,8] описан физический механизм и математическая модель образования микрократеров на облучаемой поверхности как результат развития неустойчивости тейлоровского типа [9]. Было показано, что образование микрократеров носит четко выраженный пороговый характер [8] и начинается при превышении объемной плотности вложенной энергии определенного для каждого материала критического значения. При плотностях вложенной энергии больше критической (закритический режим облучения) происходит образование и интенсивный разлет плазменного факела, в результате

чего поверхность мишени становится неустойчивой, и начальные возмущения формы поверхности развиваются в микрократеры. Если же плотность вложенной энергии меньше критической (докритический режим облучения), силы поверхностного натяжения расплава обеспечивают устойчивость поверхности, и можно ожидать уменьшения амплитуды исходных возмущений, т. е. сглаживания.

Анализ экспериментальных результатов, полученных в работах [5,6], показывает, что сглаживание рельефа поверхности происходит как при режимах облучения, приводящих к плавлению поверхностного слоя, так и при режимах, когда поверхность мишени остается в твердом состоянии. Следовательно, сглаживание поверхности при облучении нельзя объяснить только силами поверхностного натяжения.

Цель настоящей работы — исследование физических механизмов и построение математической модели сглаживания микрорельефа облучаемой поверхности в докритическом режиме облучения.

Сглаживание микрорельефа поверхности твердотельной мишени

Рассмотрим механизм сглаживания микрорельефа поверхности твердотельной мишени при облучении, который в дальнейшем для краткости будем называть как твердофазное сглаживание. При облучении твердотельной мишени с возмущенной (шероховатой) поверхностью в приповерхностном слое мишени возникают дополнительные (возмущенные) по сравнению со случаем облучения плоской поверхности поля напряжений и деформаций [10]. Наличие возмущенных деформаций понятно из следующих соображений. Облучение приводит к нагреву приповерхностного слоя мишени, в котором быстрые частицы пучка теряют свою энергию, и появлению в нем термоупругих напряжений, стремящихся увеличить объем нагретого вещества. Облучаемая

поверхность мишени является свободной, и расширение происходит до тех пор, пока не установится равновесие, соответствующее отсутствию напряжений на свободной поверхности мишени. Расширению в направлении нормали к поверхности ничто не препятствует, а расширение вдоль поверхности мишени затруднено вследствие однородности облучения (что обычно имеет место при радиационной обработке). В результате при облучении плоской поверхности мишени происходит одноосное деформирование, при котором перпендикулярные поверхности напряжения полностью снимаются, а напряжения, действующие вдоль поверхности, оказываются „запертыми“. При наличии микрощероховатостей условие отсутствия напряжений на свободной границе, которая теперь имеет более сложную форму, приводит к дополнительным деформациям, изменяющим микрорельеф поверхности. Как будет показано ниже, характер возмущенных деформаций таков, что они стремятся уменьшить шероховатость.

Если бы деформации оставались упругими, то при остывании поверхности ее рельеф возвращался бы в исходное состояние. Облучение материала потоком заряженных частиц является быстрым процессом (скорости деформаций до 10^6 с^{-1}), ему соответствует высокое значение предела текучести [11]. Поэтому на временах действия пучка деформации носят преимущественно упругий характер. С течением времени происходит падение предела текучести до его стационарного значения, возмущенные напряжения пластически релаксируют, и возмущенные деформации сохраняются, что приводит к сглаживанию рельефа поверхности. Изменение амплитуды возмущений за один импульс облучения составляет не более 3–5%, но при многократном облучении данный механизм приводит к существенному уменьшению шероховатости.

Механизм твердофазного сглаживания работает и при режимах облучения, приводящих к плавлению. Вплоть до момента плавления в приповерхностном слое существуют возмущенные напряжения и деформации. Но релаксация возмущенных напряжений в данном случае связана не с пластичностью, а с переходом поверхностного слоя в жидкое состояние и утратой им упругих свойств.

Определим поле деформаций и напряжений в твердофазной облучаемой мишени с возмущенной поверхностью, полагая, что связь между ними задается законом Гука. В силу сказанного выше будем считать, что деформации границы мишени сохраняются после облучения. Направим ось OZ в глубь мишени, а оси OX и OY — вдоль поверхности. В невозмущенном состоянии поверхность мишени является плоскостью $z = z_F$. Рассмотрим возмущение поверхности вида

$$Z(x) - z_F = a_0 \cos(kx),$$

однородное по оси OY , где a_0 — начальная амплитуда возмущения (шероховатость поверхности), $k = 2\pi/\lambda$ — волновое число, λ — длина волны возмущения.

При расширении нагретого пучком слоя мишени возникает волна сжатия-разрежения, распространяющаяся в глубь мишени. Нас будет интересовать только поле деформаций вблизи поверхности. Будем считать процесс квазистационарным, что возможно при выполнении условия $\tau \gg t_h$, где τ — длительность импульса облучения, $t_h = R/C_l$ — характерное время разгрузки нагретого пучком слоя, R — пробег частиц в веществе мишени, C_l — продольная скорость звука (так, для условий облучения [5,6] $\tau \sim 2$, $t_h \sim 0.01 \mu\text{s}$). Используем для определения поля деформаций уравнения равновесия [12]:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \sigma_{xx}(x, z)}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{xz}(x, z)}{\partial z} &= 0, \\ \frac{\partial \sigma_{xz}(x, z)}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{zz}(x, z)}{\partial z} &= 0, \end{aligned} \quad (1)$$

где тензор напряжений σ_{ik} с учетом нагрева среды пучком имеет вид [12]:

$$\sigma_{ik} = -K\alpha\Delta T\delta_{ik} + K u_{ll}\delta_{ik} + 2\mu \left(u_{ik} - \frac{1}{3} u_{ll}\delta_{ik} \right), \quad (2)$$

где u_{ik} — тензор деформаций, K и μ — изотермические модули всестороннего сжатия и сдвига соответственно, α — температурный коэффициент объемного расширения, ΔT — локальное увеличение температуры среды за счет действия пучка.

Будем считать возмущение поверхности мишени малым $ka_0 \ll 1$, тогда для нахождения поля деформаций воспользуемся теорией возмущений с точностью до первого порядка малости. Ищем поле деформаций в виде

$$u_z = u^0(z) + u_z^1(z) \cos(kx), \quad u_x = u_x^1(z) \sin(kx), \quad (3)$$

где $u^0(z)$ — поле деформаций, соответствующее случаю облучения плоской поверхности; $u_x^1(z)$, $u_z^1(z)$ — возмущенные деформации (величины первого порядка малости по ka_0). Для свободной поверхности мишени граничное условие имеет вид

$$n_k(x)\sigma_{ik}(x, z = Z(x)) = 0, \quad (4)$$

где $\mathbf{n}(x) \approx \{-ka_0 \sin(kx); 0; -1\}$ — вектор нормали к поверхности.

Далее из уравнений равновесия (1) и граничных условий (4) с учетом (2) получаем уравнения для величин нулевого и первого порядка малости (3), решив которые, находим распределение возмущенных деформаций по глубине

$$\begin{aligned} u_z^1(z) &= a_0 \alpha \Delta T_F \frac{1 + \sigma}{3(1 - \sigma)} [-(1 - 2\sigma) - k(z - z_F)] e^{-k(z - z_F)}, \\ u_x^1(z) &= a_0 \alpha \Delta T_F \frac{1 + \sigma}{3(1 - \sigma)} [2(1 - \sigma) \\ &\quad - k(z - z_F)] e^{-k(z - z_F)}, \end{aligned} \quad (5)$$

где ΔT_F — изменение температуры поверхности мишени, σ — коэффициент Пуассона. В частности, для

изменения амплитуды возмущения поверхности мишени $z = z_F$ получаем

$$\delta a = u_z^1(z_F) = -a_0 \alpha \Delta T_F \frac{(1 + \sigma)(1 - 2\sigma)}{3(1 - \sigma)}. \quad (6)$$

Из (6) следует, что возникающее при нагреве мишени поле деформаций вызывает уменьшение амплитуды возмущения поверхности, т. е. сглаживание.

Формула (6) задает изменение амплитуды δa при таком нагреве ΔT_F поверхности мишени, когда α можно считать независимым от температуры. Для учета температурной зависимости $\alpha(T)$ следует произведение $\alpha \Delta T_F$ в (6) заменить на интеграл

$$\Delta a = -a_0 \frac{(1 + \sigma)(1 - 2\sigma)}{3(1 - \sigma)} \int_{T_0}^{T_{\max}} \alpha(T) dT, \quad (7)$$

здесь Δa — изменение амплитуды возмущения поверхности за один импульс облучения, T_0 — начальная температура поверхности мишени, T_{\max} — максимальная температура, достигнутая при облучении, либо температура плавления, если произошло плавление поверхностного слоя мишени.

Соотношение (7) было получено для однородного вдоль оси OY гармонического возмущения поверхности. Возмущение более сложной формы (в том числе вида $Z(x, y)$) может быть разложено в ряд или интеграл Фурье и для каждой гармоники разложения в рамках рассматриваемого здесь линейного приближения справедливо (7). Поскольку соотношение (7) не содержит никакой информации о форме возмущения (не содержит длины волны), это означает, что весь рельеф поверхности убывает по амплитуде без изменения фурье-спектра исходного возмущения.

Гидродинамическое сглаживание

При плавлении поверхности мишени под действием интенсивного облучения начинают работать гидродинамические механизмы изменения микрорельефа. Динамика поверхности мишени определяется теперь балансом сил поверхностного натяжения, сил инерции, вызванных ускоренным движением поверхностного слоя мишени, и вязких сил. Под действием сил поверхностного натяжения возмущенная поверхность мишени начинает испытывать колебания (капиллярные волны). Наличие вязких сил приводит к диссипации энергии колебаний и к их затуханию, в результате чего амплитуда возмущений уменьшается. В этом состоит механизм гидродинамического сглаживания. Хотя силы инерции носят в целом дестабилизирующий характер, их действие при докритических режимах облучения подавлено силами поверхностного натяжения.

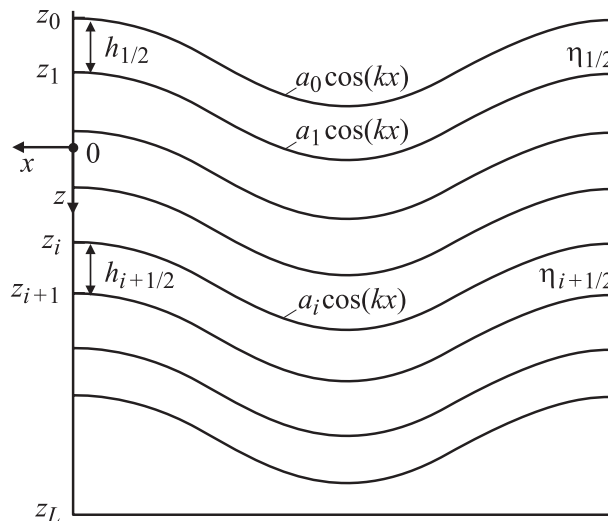


Рис. 1. Динамика многослойной среды. Геометрия задачи.

Таким образом, при докритических режимах облучения уменьшение шероховатости облучаемой поверхности обусловлено совместным действием твердофазного и гидродинамического механизмов сглаживания.

Для описания гидродинамического сглаживания рассмотрим динамику пленки расплава с учетом сил поверхностного натяжения, вязкости и инерции, а также с учетом неоднородности по плотности ρ расплавленного слоя. Получим систему уравнений для динамики возмущений. Направим ось OZ в глубину мишени, а оси OX и OY — вдоль поверхности (рис. 1). В невозмущенном состоянии поверхность мишени является плоскостью $z = z_F(t)$. Пленка расплава имеет конечную глубину, которая может меняться со временем, положение границы расплав–твердая фаза $z = z_M(t)$. При движении, связанном с динамикой возмущений, расплав рассматриваем как несжимаемую жидкость. Будем считать, что область расплава состоит из L слоев (рис. 1), течение в каждом из которых потенциально. Пронумеруем границы между слоями целыми индексами $i = 0, 1, \dots, L$ ($i = 0$ соответствует свободной поверхности мишени, $i = L$ — невозмущенной границе расплав–твердая фаза), а сами слои и относящиеся к ним величины — полуцелыми индексами $i + \frac{1}{2} = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \dots, L - \frac{1}{2}$.

Пусть на границах слоев заданы однородные вдоль оси OY гармонические возмущения $a_i(t) \cos(kx)$, причем выполняются условия малости возмущений: $a_i k \ll 1$ и $(a_i/\rho)(\partial\rho/\partial z) \ll 1 \quad \forall i \in [0, L]$. Поле смещений $\mathbf{u}(x, z, t)$, связанное с динамикой возмущений внутри каждого слоя, имеет структуру, которая соответствует потенциальному течению несжимаемой жидкости и удовлетворяет уравнению Лапласа для потенциала скорости. С учетом условий совместности деформаций $u_z^{i-1/2}(x, z_i, t) = a_i(t) \cos(kx) = u_z^{i+1/2}(x, z_i, t)$ на грани-

цах слоев получаем

$$\begin{aligned}
 u_z^{i+1/2}(x, z, t) &= \left[a_i(t) \{ \text{ch}[k(z - z_i)] \right. \\
 &\quad \left. - \text{sh}[k(z - z_i)] \text{cth}[kh_{i+1/2}] \right\} \\
 &\quad \left. + a_{i+1}(t) \frac{\text{sh}[k(z - z_i)]}{\text{sh}[kh_{i+1/2}]} \right] \cos(kx), \\
 u_x^{i+1/2}(x, z, t) &= \left[a_i(t) \{ \text{ch}[k(z - z_i)] \text{cth}[kh_{i+1/2}] \right. \\
 &\quad \left. - \text{sh}[k(z - z_i)] \right\} - a_{i+1}(t) \frac{\text{ch}[k(z - z_i)]}{\text{sh}[kh_{i+1/2}]} \right] \sin(kx),
 \end{aligned} \quad (8)$$

где $h_{i+1/2} = z_{i+1} - z_i$ — толщина слоя с номером $i + 1/2$. В дальнейшем под $u_x(x, z, t)$, $u_z(x, z, t)$ будем понимать $u_x^{i+1/2}(x, z, t)$, $u_z^{i+1/2}(x, z, t)$, где i такое, что $z_i \leq z \leq z_{i+1}$.

Построим функцию Лагранжа системы. Потенциальная энергия системы складывается из потенциальной энергии поля сил инерции и из энергии поверхностного натяжения $U = U_G + U_\sigma$.

Подсчитаем U_G . При отсутствии возмущений $u_x = u_z = 0$ массовая плотность вещества зависит только от глубины $\rho^{(0)}(z, t)$. В результате смещений распределение плотности среды изменяется, и в точке с координатами (x, z) плотность становится равной $\rho(x, z, t) = \rho^{(0)}(z - u_z(x, z, t), t)$. Изменение потенциальной энергии жидкости внутри малого объема $\delta x \delta z$ за счет смещений с точностью до членов второго порядка малости есть

$$\begin{aligned}
 \delta U_G &\approx g(z, t) \left[\int_0^{u_z(x, z, t)} \rho^{(0)}(z - z', t) dz' \right] \delta x \delta z \\
 &\approx g(z, t) \rho^{(0)}(z, t) u_z(x, z, t) \delta x \delta z \\
 &\quad - g(z, t) \frac{\partial \rho^{(0)}(z, t)}{\partial z} \frac{u_z^2(x, z, t)}{2} \delta x \delta z,
 \end{aligned}$$

где $g(z, t)$ — локальное ускорение вещества, его направление противоположно массовым силам инерции. Полное изменение потенциальной энергии на длину волны λ получается интегрированием δU_G от 0 до λ по x и от $-\infty$ до ∞ по z . Проведя интегрирование по всем слоям с учетом (8), найдем

$$\begin{aligned}
 U_G &= -\frac{\lambda}{4} \left[\sum_{i=0}^L \alpha_i(k, t) a_i^2(t) \right. \\
 &\quad \left. + \sum_{i=0}^{L-1} 2\alpha_{i+1/2}(k, t) a_i(t) a_{i+1}(t) \right], \quad (9)
 \end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned}
 \alpha_i(k, t) &= \int_{z_{i-1}}^{z_i} \left(\frac{\text{sh}[k(z - z_{i-1})]}{\text{sh}[kh_{i-1/2}]} \right)^2 g(z) \frac{\partial \rho^{(0)}(z, t)}{\partial z} dz \\
 &\quad + \int_{z_i}^{z_{i+1}} [\text{ch}[k(z - z_i)] - \text{sh}[k(z - z_i)] \\
 &\quad \times \text{cth}[kh_{i+1/2}]]^2 g(z) \frac{\partial \rho^{(0)}(z, t)}{\partial z} dz, \quad (10)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \alpha_{i+1/2}(k, t) &= \int_{z_i}^{z_{i+1}} [\text{ch}[k(z - z_i)] - \text{sh}[k(z - z_i)] \\
 &\quad \times \text{cth}[kh_{i+1/2}]] \frac{\text{sh}[k(z - z_i)]}{\text{sh}[kh_{i+1/2}]} g(z) \frac{\partial \rho^{(0)}(z, t)}{\partial z} dz.
 \end{aligned}$$

Энергию поверхностного натяжения (на λ вдоль оси OX и на единицу длины вдоль оси OY) определим из выражения

$$U_\sigma = \sum_{i=0}^L \sigma_i \int_0^\lambda \sqrt{1 + a_i^2(t) k^2 \sin^2(kx)} dx,$$

где σ_i — коэффициент поверхностного натяжения i -й границы между слоями, а интеграл представляет собой площадь поверхности соответствующей границы. При численном моделировании, мы будем полагать σ_i отличным от нуля только на свободной поверхности мишени, либо, если при облучении образуется плазма, на поверхность раздела плазма-конденсированная фаза (поверхность максимального градиента плотности). С точностью до постоянного слагаемого получаем

$$U_\sigma = \frac{\lambda}{4} \sum_{i=0}^L [\sigma_i k^2 a_i^2(t)]. \quad (11)$$

Полная потенциальная энергия с учетом (9) и (11) будет иметь вид

$$\begin{aligned}
 U &= -\frac{\lambda}{4} \left[\sum_{i=0}^L [\alpha_i(k, t) - k\sigma_i] a_i^2(t) \right. \\
 &\quad \left. + \sum_{i=0}^{L-1} 2\alpha_{i+1/2}(k, t) a_i(t) a_{i+1}(t) \right]. \quad (12)
 \end{aligned}$$

Кинетическая энергия движения, связанного с динамикой возмущений, имеет вид

$$\begin{aligned}
 T &= \frac{1}{2} \int_0^\lambda dx \int_{-\infty}^\infty dz \rho^{(0)}(z, t) [\dot{u}_x^2(x, z, t) + \dot{u}_z^2(x, z, t)] \\
 &= \frac{\lambda}{4} \left[\sum_{i=0}^L \beta_i(k, t) \dot{a}_i^2(t) + \sum_{i=0}^{L-1} 2\beta_{i+1/2}(k, t) \dot{a}_i(t) \dot{a}_{i+1}(t) \right], \quad (13)
 \end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned} \beta_i &= \frac{1}{4k} \frac{1}{\operatorname{sh}^2[kh_{i-1/2}]} [M_{i-1/2}(+2k) + M_{i-1/2}(-2k)] \\ &+ \frac{1}{4k} (1 - \operatorname{cth}[kh_{i+1/2}])^2 M_{i+1/2}(+2k) \\ &+ \frac{1}{4k} (1 + \operatorname{cth}[kh_{i+1/2}])^2 M_{i+1/2}(-2k), \\ \beta_{i+1/2} &= \frac{1}{4k} \frac{1}{\operatorname{sh}[kh_{i+1/2}]} [(1 - \operatorname{cth}[kh_{i+1/2}])M_{i+1/2}(+2k) \\ &- (1 + \operatorname{cth}[kh_{i+1/2}])M_{i+1/2}(-2k)], \end{aligned} \quad (14)$$

$$M_{i+1/2}(\pm 2k) = \int_0^{h_{i+1/2}} \rho^{(0)}(z_i + \xi) de^{\pm 2k\xi}.$$

Учет диссипации энергии (вязкости) осуществляется при помощи диссипативной функции F , удвоенное значение которой равно скорости убыли энергии системы за счет действия диссипативных сил [13]. Для потенциального течения вязкой несжимаемой жидкости диссипативная функция (скорость убыли энергии системы) сводится к поверхностному интегралу вдоль границ областей потенциального течения жидкости [14], который в нашем случае принимает вид

$$\begin{aligned} F &= \sum_{i=0}^L \left[\eta_{i-1/2} \int_0^\lambda \left(\dot{u}_x \frac{\partial \dot{u}_x}{\partial z} + \dot{u}_z \frac{\partial \dot{u}_z}{\partial z} \right) \Big|_{z=z_i-0} dx \right. \\ &\left. - \eta_{i+1/2} \int_0^\lambda \left(\dot{u}_x \frac{\partial \dot{u}_x}{\partial z} + \dot{u}_z \frac{\partial \dot{u}_z}{\partial z} \right) \Big|_{z=z_i+0} dx \right], \end{aligned}$$

где $\eta_{i+1/2}$ — коэффициент динамической вязкости слоя с номером $i + 1/2$. Проведя интегрирование с учетом (8), получаем

$$F = \frac{\lambda}{4} \left[\sum_{i=0}^L \gamma_i(k, t) \dot{a}_i^2(t) + \sum_{i=0}^{L-1} 2\gamma_{i+1/2}(k, t) \dot{a}_i(t) \dot{a}_{i+1}(t) \right], \quad (15)$$

где

$$\gamma_i = 4k \{ \eta_{i-1/2} \operatorname{cth}[kh_{i-1/2}] + \eta_{i+1/2} \operatorname{cth}[kh_{i+1/2}] \}, \quad (16)$$

$$\gamma_{i+1/2} = 4k \left\{ -\frac{\eta_{i+1/2}}{\operatorname{sh}[kh_{i+1/2}]} \right\}.$$

Записав уравнение Лагранжа

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{a}_i} \right) = \frac{\partial L}{\partial a_i} - \frac{\partial F}{\partial \dot{a}_i}$$

с учетом диссипативных сил [13], получим следующую систему уравнений:

$$\begin{aligned} &\beta_{i-1/2} \ddot{a}_{i-1} + \beta_i \ddot{a}_i + \beta_{i+1/2} \ddot{a}_{i+1} \\ &= \alpha_{i-1/2} a_{i-1} + (\alpha_i - k^2 \sigma_i) a_i + \alpha_{i+1/2} a_{i+1} \\ &- (\gamma_{i-1/2} + \dot{\beta}_{i-1/2}) \dot{a}_{i-1} - (\gamma_i + \dot{\beta}_i) \dot{a}_i \\ &- (\gamma_{i+1/2} + \dot{\beta}_{i+1/2}) \dot{a}_{i+1}, \quad i = 0, L-1. \end{aligned} \quad (17)$$

В данной системе полагаем, что $a_{-1} = 0$ (область вакуума вне мишени) и $a_L = 0$ (невозмущенная граница расплав—твердое тело).

Система уравнений (17) с учетом выражений для коэффициентов (10), (14) и (16) позволяет на фоне известного одномерного движения (по заданным распределениям $\rho^{(0)}(z, t)$ и $g(z, t)$) описывать эволюцию малых возмущений течения вещества (в том числе и динамику рельефа поверхности мишени). Полученная система уравнений справедлива и для возмущений вида $a_i(t) \cos(k_x x) \cos(k_y y)$, для которых $k = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$, а также — для возмущений вида $a_i(t) J_0(kr)$, где J_0 — функция Бесселя нулевого порядка.

Для нахождения распределений $\rho^{(0)}(z, t)$ и $g(z, t)$ использовался пакет программ BETAИN1 [15]. В пакете совместно решаются кинетическое уравнение для быстрых частиц, одномерная система уравнений механики сплошной среды (МСС) для модели упругопластических течений с учетом теплопроводности и широкодиапазонного уравнения состояния. Решение уравнений МСС осуществляется на лагранжевой сетке, причем координаты скорости и ускорения определены в узлах сетки $\{z_i, i = 0, \dots, I_0 - 1\}$, а плотности приписываются веществу ячеек $\{\rho_{i+1/2}, i = 0, \dots, I_0 - 2\}$, где I_0 — число узлов расчетной сетки. При описании динамики возмущений будем рассматривать расчетные ячейки BETAИN1 как отдельные слои потенциального течения с однородной плотностью. Количество таких слоев меняется во времени $L(t)$ и определяется текущей глубиной ванны расплава. Для производной $(\partial \rho^{(0)}(z, t) / \partial z)$ записываем

$$\frac{\partial \rho^{(0)}(z, t)}{\partial z} = \sum_{i=0}^{L(t)-1} (\rho_{i+1/2} - \rho_{i-1/2}) \delta(z - z_i),$$

причем $\rho_{1/2} = 0$. Тогда коэффициенты (10), (14) и (16) принимают вид

$$\begin{aligned} \alpha_i &= g_i(\rho_{i+1/2} - \rho_{i-1/2}); \quad \alpha_{i+1/2} = 0; \\ \beta_i &= \frac{1}{k} [\rho_{i-1/2} \operatorname{cth}(kh_{i-1/2}) + \rho_{i+1/2} \operatorname{cth}(kh_{i+1/2})]; \\ \beta_{i+1/2} &= -\frac{1}{k} \rho_{i+1/2} \frac{1}{\operatorname{sh}(kh_{i+1/2})}; \\ \gamma_i &= 4k [\eta_{i-1/2} \operatorname{cth}(kh_{i-1/2}) + \eta_{i+1/2} \operatorname{cth}(kh_{i+1/2})]; \\ \gamma_{i+1/2} &= 4k \left[-\frac{\eta_{i+1/2}}{\operatorname{sh}(kh_{i+1/2})} \right]. \end{aligned} \quad (18)$$

Численное решение системы уравнений (17) с учетом коэффициентов (18) совместно с BETAIN1 позволяет описать стадию гидродинамического сглаживания рельефа поверхности мишени, облучаемой интенсивным потоком ускоренных заряженных частиц.

Заметим, что если плотность расплава постоянна и равна ρ , то система уравнений (18) сводится к единственному уравнению для амплитуды свободной поверхности $a_0(t)$:

$$\ddot{a}_0(t) + \frac{4k^2\eta}{\rho} \dot{a}_0(t) + \left[-\frac{kg_0(t)}{\text{cth}(kH)} + \frac{k^3\sigma_0}{\rho \text{cth}(kH)} \right] a_0(t) = 0, \quad (19)$$

где H — полная глубина расплава. Уравнение (19) есть известное уравнение для капиллярно-гравитационных волн (неустойчивости) в слое конечной глубины с учетом вязкости [16].

Численное моделирование. Обсуждение результатов

На основе предложенной математической модели проведено численное моделирование динамики микрорельефа поверхности железной мишени, облучаемой интенсивным потоком электронов с длительностью импульса облучения $\tau = 2 \mu\text{s}$, энергией электронов в диапазоне $T_e = 20\text{--}60 \text{ KeV}$ и плотностью вложенной энергии $w = 1\text{--}12 \text{ J/cm}^2$ за импульс. Параметры пучка соответствуют экспериментам [5].

При расчетах полей $T(z, t)$, $\rho^{(0)}(z, t)$ и $g(z, t)$ по BETAIN1 использовалось широкодиапазонное уравнение состояния [17]. По соотношению (7) определялось изменение амплитуды за счет твердофазного механизма. Если вложенная в мишень энергия была достаточна для образования жидкой фазы, то далее проводилось численное интегрирование системы уравнений (17) с коэффициентами (18).

Динамика поверхности при гидродинамическом сглаживании определяется длиной волны возмущения. Изменение амплитуды возмущения за один импульс характеризуется приведенной амплитудой $a_0(t_c, \lambda)/a_0(t=0, \lambda)$. Здесь t_c — время кристаллизации слоя расплава, для которого использовалась оценка $t_c = \tau + t_{ic}$, где $t_{ic} = R^2/\chi$ — характерное время теплопроводности, χ — температуропроводность, R — пробег быстрых электронов в веществе мишени.

На рис. 2 представлены приведенные амплитуды для докритического (1 — $w = 7.2 \text{ J/cm}^2$) и закритического (2 — $w = 10.8 \text{ J/cm}^2$) режимов облучения (учтен только гидродинамический этап). После плавления поверхностное натяжение инициирует стоячие капиллярные (капиллярно-гравитационные) волны, частота которых растет с уменьшением масштаба возмущения. Амплитуда колебаний (и соответствующих возмущений) уменьшается во времени из-за вязкого трения, которое также является наиболее сильным для мелкомасштабных возмущений. В результате мелкомасштабные возмущения

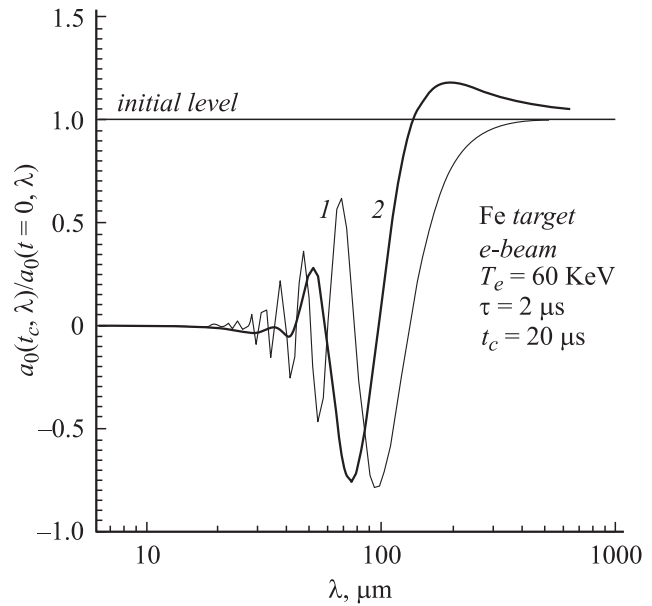


Рис. 2. Приведенные амплитуды для докритического и закритического режимов облучения.

(с $\lambda < 20 \mu\text{m}$) на гидродинамическом этапе затухают практически полностью. Возмущения средних масштабов ($20 < \lambda < 100 \mu\text{m}$) также уменьшаются по амплитуде и испытывают колебания под действием капиллярных сил, но запасенная в них энергия не успевает полностью поглотиться за счет действия вязких сил. Поведение крупномасштабных возмущений ($\lambda > 100 \mu\text{m}$) зависит от того, является ли режим облучения докритическим или закритическим. При докритическом режиме приведенная амплитуда стремится к 1 снизу при $\lambda \rightarrow \infty$, т.е. крупномасштабные возмущения также начинают испытывать колебания под действием капиллярных сил, но поскольку их частота мала, амплитуда возмущений не успевает сколько-нибудь заметно измениться за время кристаллизации $t_c \approx 20 \mu\text{s}$. При надкритическом режиме заметную роль играют силы инерции, дестабилизирующие границу. Капиллярные силы $\sim k^2$, а силы инерции от k не зависят (17), (18), поэтому для крупномасштабных возмущений при надкритическом режиме являются преобладающими, вызывая их рост. Приведенная амплитуда при надкритическом режиме имеет максимум больше единицы в области $\lambda \approx 100\text{--}200 \mu\text{m}$. Это означает, что мишень подвержена росту микрократеров соответствующих размеров, в то же время происходит сглаживание мелкомасштабных возмущений. Заметим, что при докритическом режиме за результирующую поверхность после облучения принимается свободная поверхность мишени, а при закритическом — поверхность раздела плазма-конденсированная фаза, что учитывает унос плазменного факела. В дальнейшем будем рассматривать только докритические режимы облучения.

Рассмотрим изменение микрорельефа поверхности под действием облучения с учетом всех механизмов

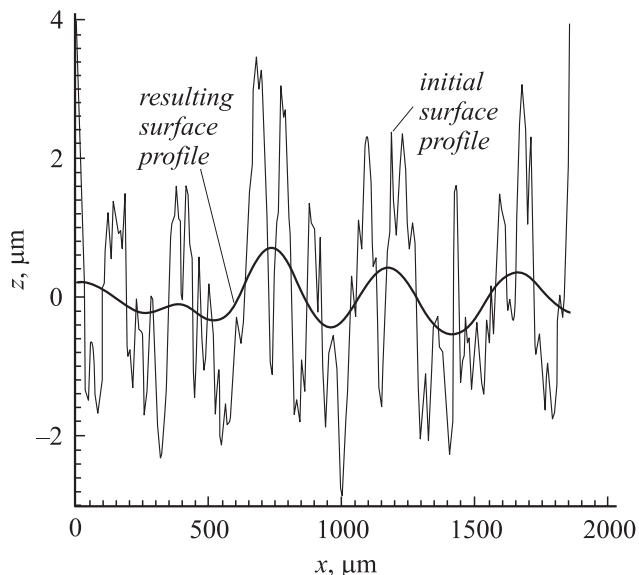


Рис. 3. Исходная поверхность железной мишени и поверхность после облучения (рассчитанная) $N = 30$ импульсами электронного облучения с длительностью $\tau = 2 \mu\text{s}$, энергией электронов $T_e = 60 \text{ KeV}$ и плотностью вложенной энергии за импульс $w = 7.2 \text{ J/cm}^2$.

сглаживания. В качестве начального профиля поверхности использовался профиль, приведенный в работе [5] (рис. 3). Определялся спектр начальных возмущений $a(\lambda)$ (рис. 4, *a*), далее по рассчитанным ранее приведенным амплитудам определялось изменение спектра (рис. 4, *b, c*), и восстанавливался результирующий профиль поверхности (рис. 3). При этом многократное облучение учитывалось возведением приведенной амплитуды в степень числа импульсов облучения. Применимость используемого здесь линейного приближения не нарушается со временем, поскольку амплитуды возмущений монотонно уменьшаются во времени (при докритическом режиме облучения).

Сравнив действие твердофазного и гидродинамического механизмов сглаживания (рис. 4), отметим, что первый приводит к равномерному уменьшению амплитуд по всему спектру (как следует из (7), эффект не зависит от k), а второй наиболее эффективно удаляет из спектра возмущений мелкомасштабные возмущения. В результате при режимах, не приводящих к плавлению, общий уровень неровностей (шероховатость) уменьшается, но форма профиля (спектральный состав) не изменяется. А при режимах, когда работает гидродинамический механизм, поверхность становится существенно более гладкой (рис. 3), содержащей только неровности больших масштабов.

На рис. 5 и 6 приводится сравнение результатов наших расчетов с экспериментальными данными [5]. На рис. 5 приведена зависимость результирующей шероховатости R_z поверхности мишени от вложенной за импульс плотности энергии (после 30 импульсов облу-

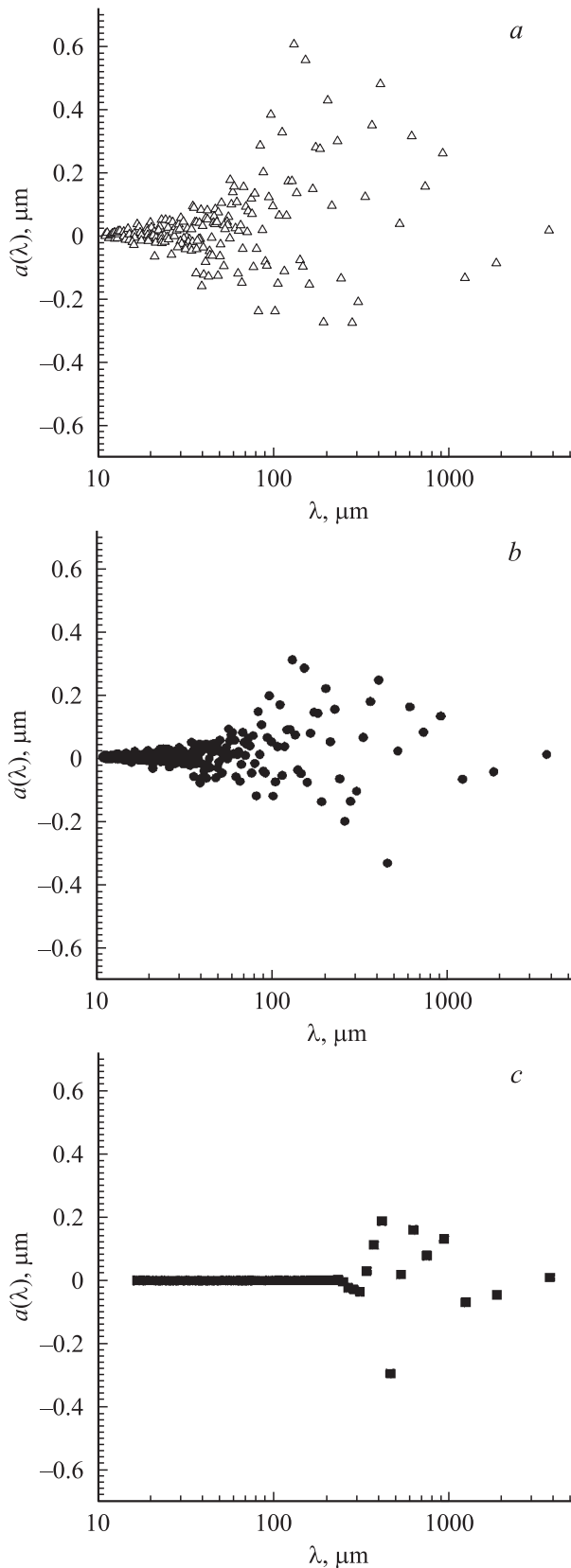


Рис. 4. Исходный спектр возмущений поверхности (*a*), изменение спектра за счет механизма твердофазного сглаживания (*b*) и за счет совместного действия твердофазного и гидродинамического сглаживания (*c*). Железная мишень, электронное облучение $N = 30$, $T_e = 60 \text{ KeV}$, $w = 7.2 \text{ J/cm}^2$.

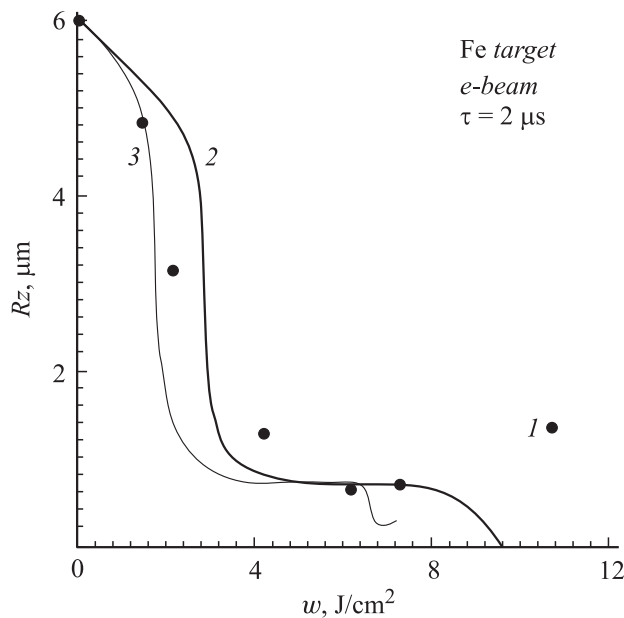


Рис. 5. Зависимость шероховатости поверхности Rz после $N = 30$ импульсов облучения от плотности вложенной за один импульс энергии w . Сравнение результатов расчетов (кривая 2 — $T_e = 60$, 3 — 40 KeV) с экспериментальными данными [5] (точки 1).

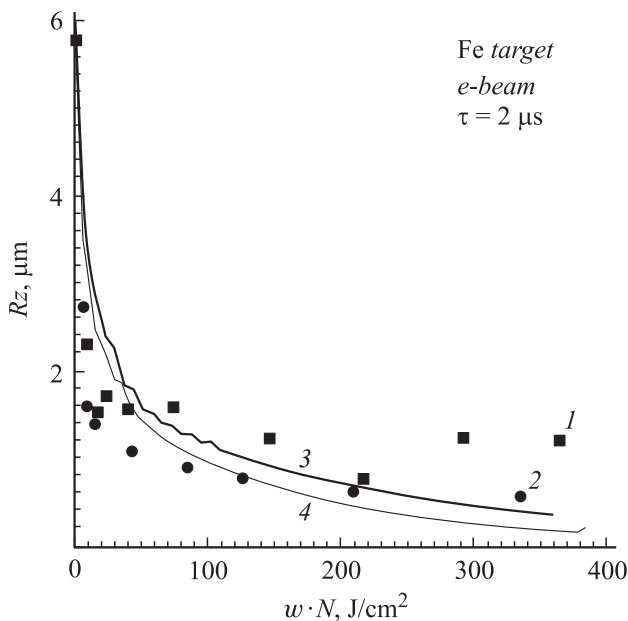


Рис. 6. Зависимость шероховатости поверхности Rz при многократном облучении от плотности полной вложенной энергии $w \cdot N$ (от числа импульсов). Сравнение результатов расчетов (кривая 3 — 7.2 , 4 — 4.8 J/cm²) с экспериментальными данными [5] (квадраты 1 — $w = 7.3$, кружки 2 — 4.2 J/cm²).

чения). В интервале $w \sim 2-3$ J/cm² происходит переход от твердофазного механизма сглаживания к совместному действию твердофазного и гидродинамического механизмов, что сопровождается резким уменьшением

шероховатости. При $w > 7.4$ J/cm² для $T_e = 40$ KeV и при $w > 9.6$ для $T_e = 60$ в расчетах происходит переход к закритическому режиму, что сопровождается ростом возмущений с $\lambda \sim 100-200$ μ m на фоне сглаживания более мелкомасштабных, в целом Rz растет. В экспериментах и при плотности энергии $w = 10.8$ J/cm² наблюдается уменьшение Rz , что свидетельствует о докритичности такого уровня воздействия. Данное расхождение объясняется либо отличием свойств используемых в [5] сталей NAK80 и NAK55 от свойств железа, для которого использовалось уравнение состояния [17], либо грубым описанием поведения железа в области плавления в рамках уравнения состояния [17].

Вблизи пороговой энергии перехода к закритическому режиму расчеты предсказывают увеличение скорости сглаживания, что обусловлено влиянием сил инерции. В диапазонах $w = 3.5-6$ и $4-8$ J/cm² при $T_e = 40$ и 60 KeV соответственно рассчитанная шероховатость слабо зависит от вложенной энергии и равна примерно $Rz \approx 0.8$ μ m. В этой области твердофазный эффект достигает своего максимального значения (температура T_{max} в (7) достигает температуры плавления), силы инерции практически не проявляются, и на гидродинамическом этапе динамика определяется только силами поверхностного натяжения и вязкими силами, которые за одинаковое время t_c приводят к одинаковому изменению рельефа. Для более точных расчетов необходимо учитывать зависимость времени кристаллизации от вложенной энергии $t_c(w)$, для чего должна быть решена задача кристаллизации слоя расплава. В экспериментах в области $w = 4-11$ J/cm² наблюдается слабая зависимость Rz от w .

В зависимости шероховатости от плотности полной вложенной энергии при многократном облучении (рис. 6) как в экспериментах [5], так и в расчетах наблюдается резкое уменьшение шероховатости во время первых 5–10 импульсов облучения и существенно более медленное уменьшение при последующих импульсах облучения. Наибольшая эффективность сглаживания на первых импульсах облучения обусловлена, во-первых, быстрым затуханием всех коротковолновых возмущений при гидродинамическом сглаживании и, во-вторых, пропорциональностью скорости изменения амплитуды оставшихся длинноволновых возмущений текущей амплитуде при каждом импульсе. В экспериментах при $w \cdot N > 200$ J/cm² шероховатость Rz выходит на насыщение $\sim 0.5-1$ μ m, а в расчетах продолжает убывать. Такое поведение экспериментальных кривых, по-видимому, обусловлено нарушением поверхности расплава вследствие его кристаллизации.

Также было проведено численное моделирование сглаживания микрорельефа при облучении титановой мишени. Результаты моделирования согласуются с экспериментальными данными [6]. При этом необходимо отметить, что существенную роль в эффективности сглаживания играет начальный спектр возмущений. Так, спектр шероховатости поверхности титановой мишени

в экспериментах [6] содержит преимущественно длинноволновые возмущения ($\lambda \sim 400 \mu\text{m}$), слабо затрагиваемые гидродинамическим сглаживанием (рис. 2), в результате основным механизмом здесь является твердофазное сглаживание. Согласие экспериментальных и численных результатов достигается лишь при учете конкретного начального профиля поверхности титановой мишени, приведенного в [6].

Заключение

Предложены физические механизмы и математическая модель сглаживания рельефа поверхности облучаемой мишени. До момента плавления поверхностного слоя мишени уменьшение амплитуды возмущений обусловлено упруго-пластическим деформированием (твердофазный механизм сглаживания). После плавления и до момента кристаллизации изменение рельефа происходит под действием поверхностного натяжения, вязких сил и сил инерции (гидродинамический механизм сглаживания).

На твердофазном этапе сглаживания происходит уменьшение шероховатости без изменения спектрального состава возмущений, на гидродинамическом этапе наиболее эффективно происходит затухание мелкомасштабных возмущений. Сглаживание рельефа имеет место лишь при плотностях энергии облучения, не превышающих определенного критического значения (при докритических режимах облучения).

Существует интервал плотности вложенной энергии, внутри которого результирующая шероховатость обработанной поверхности слабо зависит от условий облучения. Поэтому при технологической обработке эффективно использовать минимальную энергию из этого интервала. При многократном облучении наиболее эффективно уменьшение шероховатости наблюдается на первых импульсах облучения. Эффективность сглаживания микрорельефа и оптимальные режимы облучения зависят не только от свойств материала мишени, но и от спектрального состава начальных возмущений конкретной поверхности.

Результаты проведенного численного моделирования соответствуют экспериментальным данным [5,6]. Разработанная математическая модель может использоваться для прогнозирования изменения рельефа поверхности облучаемой мишени и выбора режимов обработки в задачах радиационных технологий.

Список литературы

- [1] Бойко В.И., Валяев А.Н., Погребняк А.Д. // УФН. 1999. Т. 169. № 11. С. 1243–1272.
- [2] Shulov V.A., Engelko V.I., Kovalev I.V., Mueller G. // Proc. of the 7th Int. Conf. on Modification of Materials with Particle Beams and Plasma Flows. Tomsk, 2004. P. 289.
- [3] Korotaev A.D., Ovchinnikov S.V., Pochivalov Yu.I. et al. // Surface and Coatings Technology. 1998. Vol. 105. P. 84.

- [4] Korotaev A.D., Tyumentsev A.N., Tretyak M.V. et al. // Physics of Metals and Metallography. 2000. Vol. 89. P. 54.
- [5] Raharjo P., Uemura K., Okada A., Uno Y. // Proc. of the 7th Int. Conf. on Modification of Materials with Particle Beams and Plasma Flows. Tomsk, 2004. P. 263.
- [6] Raharjo P., Uemura K., Okada A., Uno Y. // Proc. of the 7th Int. Conf. on Modification of Materials with Particle Beams and Plasma Flows. Tomsk, 2004. P. 267.
- [7] Волков Н.Б., Майер А.Е., Яловец А.П. // ЖТФ. 2002. Т. 72. Вып. 8. С. 34.
- [8] Волков Н.Б., Майер А.Е., Талала К.А., Яловец А.П. // Письма в ЖТФ. 2006. Т. 32. Вып. 10. С. 20.
- [9] Chandrasekhar S. // Hydrodynamic and Hydromagnetic Stability. Oxford: Clarendon, 1961; Richtmyer R.D. // Comm. on Pure and Appl. Math. 1960. Vol. 72. P. 297.
- [10] Майер А.Е., Яловец А.П. // ЖТФ. 2006. Т. 76. Вып. 4. С. 67.
- [11] Meyer L.W., Kunze H.D., Seifert K. Dynamic Properties of High-Strength Steels at Stretching in Shock Waves and High-Strain-Rate Phenomena in Metals / Ed. by M.A. Meyers and L.E. Murr. New York: Plenum Press, 1981. P. 61–67.
- [12] Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теория упругости. М.: Наука, 1965. 204 с.
- [13] Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Механика. М.: Наука, 1965. 204 с.
- [14] Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Гидродинамика. М.: Физматлит, 2003. 736 с.
- [15] Яловец А.П., Майер А.Е. // Proc. of 6th Int. Conf. on Modification of Materials with Particle Beams and Plasma Flows. Tomsk, 2002. P. 297.
- [16] Piesset M.S., Whipple C.G. // Physics of Fluids. 1974. Vol. 17. N 1.
- [17] Колгатин С.Н., Хачатурьянец А.В. // ТВТ. 1982. Т. 20. Вып. 3. С. 90.