

Моделирование температурных полей в металлах и сплавах при энергетическом воздействии ионных пучков высокой импульсной мощности субмиллисекундной длительности

А.И. Рябчиков, Д.Д. Зайцев, А.И. Иванова*

Национальный исследовательский Томский политехнический университет, Томск, Россия

**ddz5@tpu.ru*

Аннотация. Метод высокоинтенсивной имплантации мощных ионных пучков субмиллисекундной длительности предопределяет значительный импульсный нагрев приповерхностного слоя облучаемой мишени с последующим сверхбыстрым охлаждением. Численным моделированием исследованы динамические изменения температурных полей в титане (BT1-0), алюминии (АД1), сплаве Zr-1Nb (Э110), сталях (12Х18Н10Т и 40Х), существенно различающихся по физико-механическим свойствам. В работе рассмотрена динамика градиента температуры в приповерхностном слое и на больших глубинах матричных материалов при воздействии пучков ионов субмиллисекундной длительности с импульсной плотностью мощности до $1 \cdot 10^9$ Вт/м². Определены параметры ионных пучков, обеспечивающих импульсный нагрев поверхностного слоя различных материалов до температуры плавления. Исследовано как одноимпульсное, так и импульсно-периодическое облучение, в том числе с учетом нагрева всего объема материала. Показано, что после окончания импульса ионного пучка высокоскоростной нагрев поверхностных слоев металлов и сплавов переходит в сверхскоростное охлаждение за счет отвода тепла в основной объем матричного материала благодаря теплопроводности.

Ключевые слова: численное моделирование, высокоинтенсивная ионная имплантация, температурные поля, титан, алюминий, сплав Zr-1Nb, сталь 12Х18Н10Т, сталь 40Х, пучки субмиллисекундной длительности.

1. Введение

В настоящий момент приобретают широкое распространение методы поверхностной модификации различных материалов с применением пучков заряженных частиц (электронных и ионных), потоков плазмы (металлической или газовой), а также лазерного излучения различной мощности [1–10]. Среди многих подходов выделяется новый метод высокоинтенсивной ионной имплантации с импульсно-периодическим энергетическим воздействием ввиду того, что он позволяет модифицировать приповерхностные слои изделия, но при этом сохранять структуру основного матричного материала. Особенность данного метода заключается в значительном нагреве приповерхностных слоёв субмиллисекундным ионным пучком высокой плотности мощности [11]. Для данного метода ионной имплантации важно, чтобы энергетическое состояние системы приближалось и даже достигало области плавления ($T_{пл}$), а диффузионные процессы становились наиболее интенсивными. В связи с чем, процесс поиска оптимальных параметров обработки имеет большое значение. Применение численного моделирования позволит ускорить экспериментальную работу, а также сделает возможным теоретическое исследование диффузионных процессов при разных параметрах обработки ионным пучком [12]. С целью эффективной высокоинтенсивной ионной имплантации требуется значительный импульсный нагрев поверхности металла до температур, при которых имеет место значимый диффузионный массоперенос ввиду стремительного увеличения коэффициента диффузии. Также такой характер энергетического воздействия на образец может обеспечивать радиационно-стимулированную диффузию примесных атомов на глубины, значительно превышающих проективный пробег ионов в веществе. Вместе с этим, нецелесообразно нагревать весь объем изделия до высоких температур, так как это может повлечь за собой существенный рост зерна и, как следствие, ухудшение микроструктуры всего образца. Для

исследуемых материалов предельные температуры ($T_{пред}$), при которых характерны такие процессы, следующие: $T_{Ti} = 750 \text{ }^\circ\text{C}$ [13], $T_{Zr-1Nb} = 700 \text{ }^\circ\text{C}$ [14], $T_{40X} = T_{12X18H10T} = 850 \text{ }^\circ\text{C}$, $T_{Al} = 330 \text{ }^\circ\text{C}$. В случае алюминия не наблюдается значительного роста зерна при нагреве в процессе ионной имплантации. Однако ему свойственно существенное термическое расширение при высоких температурах, что ограничивает мощностной режим обработки данного металла [15]. Таким образом, исследуются температурные режимы металлов и сплавов в условии энергетического воздействия ионного пучка, при котором средняя температура образца не будет превышать предельного значения, а импульсная будет достаточно велика, чтобы диффузионные процессы протекали наиболее интенсивно. Настоящая работа посвящена исследованию динамики изменения температурных полей в различных материалах мишени при одноимпульсном и импульсно-периодическом воздействии на поверхность пучков ионов субмиллисекундной длительности с импульсной плотностью мощности до $1 \cdot 10^9 \text{ Вт/м}^2$.

2. Описание модели

Численное моделирование динамики температурных полей при высокоинтенсивном воздействии ионного пучка на поверхность образца выполнялось с применением уравнения теплопроводности. Для увеличения сходимости численного метода и сокращения времени расчетов применялось допущение, связанное с азимутальной симметрией исследуемой системы. Данное условие позволяло выполнить переход от объемной геометрии к двумерной задаче в цилиндрической системе координат. Расчетная область модели приведена на рис. 1. Исследуемые образцы имеют форму диска с радиусом $R = 10 \text{ мм}$ и толщиной $h = 3 \text{ мм}$ и фиксируются на массивном стальном держателе. Также предполагается идеальный контракт между мишенью и держателем. На рис. 2 изображено схематичное представление импульсно-периодического энергетического воздействия ионного пучка.

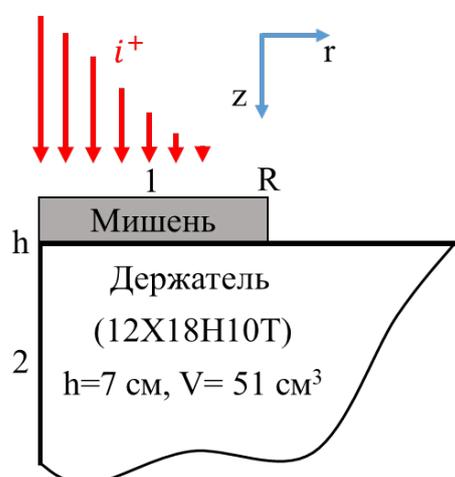


Рис. 1. Расчетная область, где R и h – радиус и толщина образцов.

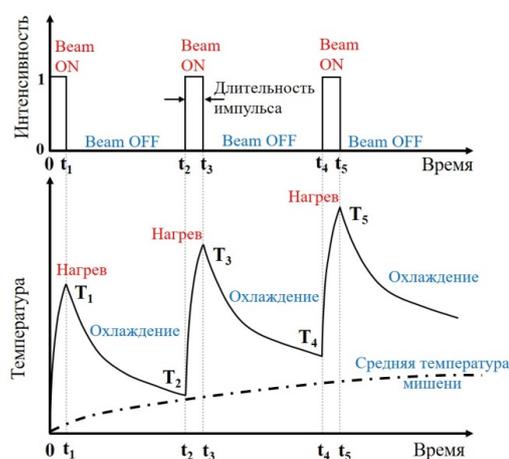


Рис. 2. Схематичное представление импульсно-периодического нагрева ионным пучком.

Тепловой расчет был проведен в пакете Comsol Multiphysics с применением модуля Heat Transfer Module [16]. Математическая постановка и граничные условия модели теплопередачи приведены в таблице 1. В данных расчетах рассматриваются варианты, при которых температура поверхности в импульсе не достигает плавления. В связи с чем, был проведен тепловой анализ в области $T_{нл}$ разных материалов ($T_{нл}(Zr-1Nb) = 1857 \text{ }^\circ\text{C}$, $T_{нл}(Ti) = 1857 \text{ }^\circ\text{C}$, $T_{нл}(Al) = 660 \text{ }^\circ\text{C}$, $T_{нл}(Сталь1) = T_{нл}(Сталь2) = 1420 \text{ }^\circ\text{C}$), а также при условии, что средняя температура вне импульса не достигала $T_{пред}$.

Таблица 1. Основные уравнения и граничные условия модели теплопередачи.

№ границы	Граничное условия	Выражение	№
Вся геометрия	Термомеханические нелинейные свойства материалов ($C_p(T)$, $\rho(T)$, $\lambda(T)$)	Zr-1Nb (Э110) [17–19]	(1а)
		Алюминий (АД1) [15]	(1б)
		Титан (ВТ 1-0) [20, 21]	(1в)
		Сталь 1 (12Х18Н10Т) [22, 23]	(1г)
		Сталь 2 (40Х) [24, 25]	(1д)
Вся геометрия	Уравнение теплопроводности	$\rho c_p \frac{\partial T(r,z,t)}{\partial t} = \lambda \left[\frac{1}{r} \frac{\partial T(r,z,t)}{\partial r} + \frac{\partial^2 T(r,z,t)}{\partial r^2} + \frac{\partial^2 T(r,z,t)}{\partial z^2} \right]$	(2)
1	Тепловой поток с поверхности	$-\lambda \frac{\partial T(r,z,t)}{\partial z} \Big _{z=0, 0 \leq r \leq R} = \beta \cdot \frac{P}{g} - \varepsilon \sigma [T^4 - T_{amb}^4]$	(3)
1	Плотность мощности ионного пучка	$P_g = U \cdot j(r) = U \cdot j_{max} \cdot \exp \left[-\frac{(r)^2}{2\omega^2} \right]$	(4)
1	Аналитическое выражение импульсно-периодического нагрева	$\beta = H_s \left(\sin \left[\frac{2\pi(t+t_0)}{T} \right] - A \right), A = \cos \left(\frac{\pi \cdot \tau}{T} \right), t_0 = \frac{T \cdot \arcsin(A)}{2\pi}$	(5)
Все внешние границы	Излучение с поверхностей	$-\lambda \frac{\partial T(r,z,t)}{\partial r} = -\varepsilon \sigma [T^4 - T_{amb}^4], -\lambda \frac{\partial T(r,z,t)}{\partial z} = -\varepsilon \sigma [T^4 - T_{amb}^4]$	(6)
2	Условие азимутальной симметрии	$-\lambda \frac{\partial T(r,z,t)}{\partial r} \Big _{r=0, 0 \leq z \leq h} = 0$	(7)

где C_p , ρ , λ – удельная теплоемкость, плотность и коэффициент теплопроводности, соответственно, для каждого из исследуемых материалов; ε – приведённая степень черноты поверхности образцов для различных материалов: $\varepsilon_{Zr-1Nb} = 0.6$, $\varepsilon_{Al} = 0.2$, $\varepsilon_{Ti} = 0.31$, $\varepsilon_{Сталь\ 1} = \varepsilon_{Сталь\ 2} = 0.4$; σ – постоянная Стефана-Больцмана; H_s – функция Хевисайда; $j(r)$ и U – плотность тока пучка и ускоряющее напряжение; $\tau = 450$ мкс – длительность импульса; $j_{max} = 1-2$ А/см² и $\omega = 2.8$ м – максимальное значение и дисперсия распределения плотности тока [26].

В данной работе исследуются температурные поля в материалах при импульсном воздействии пучка высокой плотности мощности на различные материалы. С этой целью вводится аналитическая функция β (5) для моделирования повторяющихся импульсов ионного пучка. Как было ранее показано (рис. 2), во время подачи первого импульса ионный пучок включается с определенной длительностью импульса τ , а затем после окончания импульса следует охлаждение за счет рассеивания тепла во всём объеме образца и держателя до начала следующего импульса (время $t_2 = 1/f$). Из этого следует, что время включения пучка моделируется прямоугольной функцией. Функция β отлична от нуля только при $t \geq 0$ с и $t \leq \tau$ с.

3. Результаты и их обсуждение

Была определена максимальная импульсная плотность мощности ионного пучка при исходной температуре, равной комнатной (рис. 3а) и при $j_{max} = 2$ А/см². Также подобрана усредненная плотность мощности по периоду, при которой достигаются предельные температуры для металлов и сплавов. Для всех материалов исследовался нагрев при одинаковом общем токе пучка 0.5 А с максимальной плотностью ионного тока 1 А/см², но

при разных частотах и ускоряющих напряжениях. Зависимость температуры мишеней из различных сплавов от времени представлены на рис. 3б.

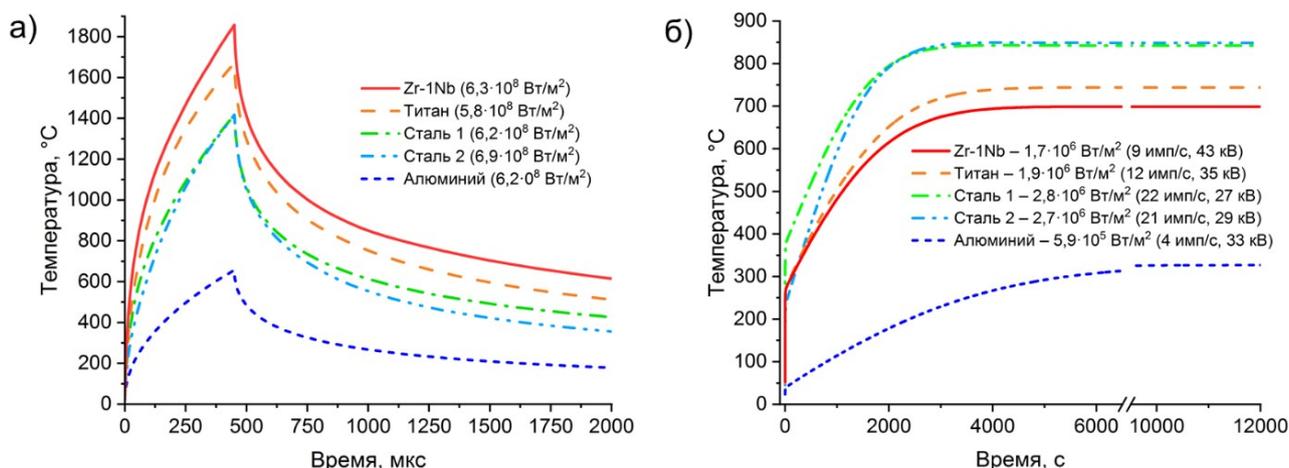


Рис. 3. Зависимость температуры мишеней из различных материалов от времени при нагреве пучком с импульсной плотностью мощности $q_{имп}$ (а) и с усреднённой плотностью мощности по периоду $q_{уср}$ (б).

Данные рис. 3а показывают, что максимальная плотность мощности очень сильно зависит от термомеханических свойств материалов. В частности, для таких материалов как алюминий, сталь 40Х и сплав Zr-1Nb предельное значение энергетического потока примерно одинаково, но $T_{пл}$ сильно отличается. Из этого следует, что принципиально важно проводить тепловой расчет с учетом зависимостей удельной теплоемкости, плотности и коэффициент теплопроводности от температуры.

На рис. 4 представлены графики динамического изменения энергетического состояния образцов при импульсном нагреве ионным пучком с высокой плотностью мощностью, как при исходной температуре 20 °С (рис. 4а), также и в зависимости от средних температур, полученных при усредненном энергетическом потоке (рис. 4б) из рис. 3. При достижении состояния поверхности и приповерхностных слоёв близких к плавлению имеет место значительное увеличение коэффициента диффузии [27].

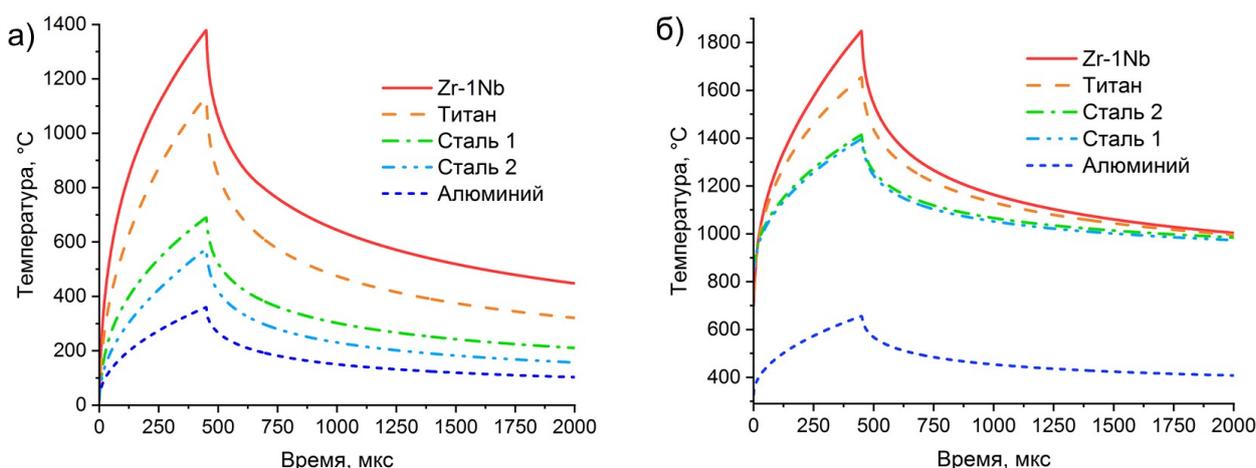


Рис. 4. Зависимость температуры от времени при $T_0 = 20$ °С (а) и $T_0 = T_{пред}$ (б) в установившемся режиме обработки различных поверхностей ионным пучком с импульсной плотностью мощности $q_{имп}$:
 Zr-1Nb – $4.3 \cdot 10^8$ Вт/м² (43 кВ), Ti – $3.5 \cdot 10^8$ Вт/м² (35 кВ), Al – $3.3 \cdot 10^8$ Вт/м² (33 кВ),
 Сталь 1 – $2.7 \cdot 10^8$ Вт/м² (27 кВ), Сталь 2 – $2.9 \cdot 10^8$ Вт/м² (29 кВ).

Как видно из зависимостей на рис. 3 и рис. 4, оптимальные условия нагрева образцов различаются не только при расчете средней температуры, но и при импульсном воздействии. При больших энергетических потоках, чем приведенные на рис. 3, достигается условие плавления поверхности мишени. Также наличие в системе массивного держателя делает возможным проводить обработку при больших плотностях мощности ионного пучка.

На рис. 5 представлены градиенты температуры как по сечению пучка, так и по глубине в конце длительности импульса, а также при различных начальных условиях фоновой температуры.

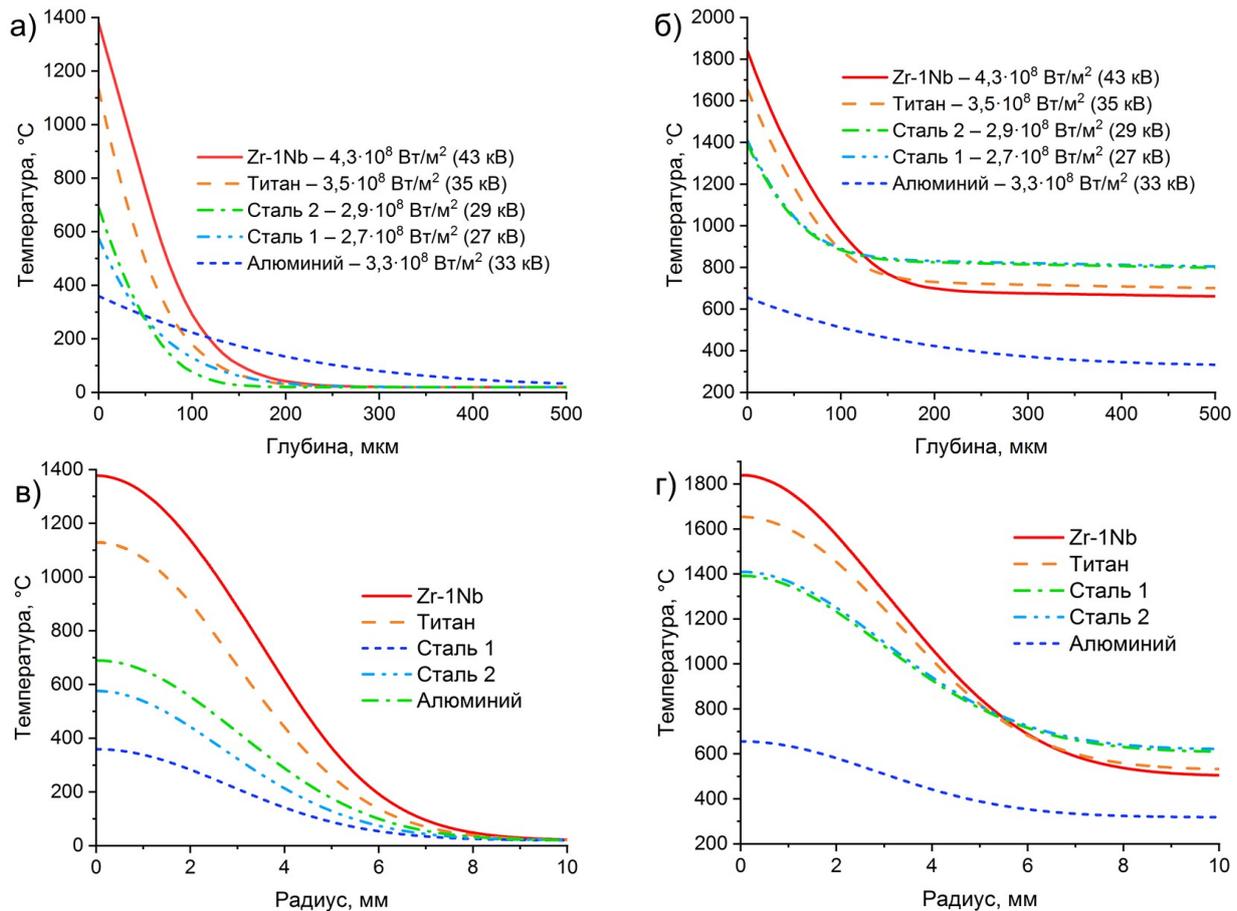


Рис. 5. Градиент температуры по радиусу r и глубине z при воздействии пучка на поверхности мишеней в конце импульса (450 мкс): (а, в) – при $T_{cp} = 20$ °С, (б, г) – при $T_{cp} = T_{пред}$.

Из графиков видно, что имеет место значительный импульсный нагрев материалов как по глубине, так и по радиусу мишеней. Наибольший градиент температуры сосредоточен на глубине порядка 100–200 мкм, а матричный материал имеет энергетическое состояние близкое к начальному. Данное обстоятельство связано с тем, что происходит быстрое рассеивание тепла в объеме мишени благодаря теплопроводности. Также градиент температуры по сечению пучка соответствует распределению плотности тока, но при начальном условии нагрева $T_{cp} = T_{пред}$ имеет место нелинейный характер пространственного распределения нагрева относительно комнатной температуры. Это связано с нелинейными свойствами материалов, поэтому очень важно учитывать в расчетах особенности каждого вещества.

4. Заключение

С использованием численного моделирования проведено исследование динамики изменения температурных полей в различных металлах и сплавах. В зависимости от их свойств и плотности мощности ионного пучка субмиллисекундной длительности были подобраны оптимальные режимы обработки. Выявлены условия энергетического воздействия, обеспечивающие импульсный нагрев приповерхностных слоёв до высоких температур близких к области плавления. Полученные предельные импульсные мощности пучка при нагреве от $T_{пред}$ металлов составили $P_{Ti} = 3.5 \cdot 10^8$ Вт/м² и $P_{Al} = 3.3 \cdot 10^8$ Вт/м², а для сплавов $P_{Zr-1Nb} = 4.3 \cdot 10^8$ Вт/м², $P_{Сталь\ 1} = 2.7 \cdot 10^8$ Вт/м² и $P_{Сталь\ 2} = 2.9 \cdot 10^8$ Вт/м². Вместе с этим средняя температура в основном объеме материалов не достигала значений, соответствующих ухудшению микроструктуры и эксплуатационных свойств изделий. Также были показаны графики распределения температуры и по глубине мишени, и по сечению пучка в конце импульса ионного пучка. Согласно этим результатам важно учитывать нелинейные термомеханические свойства материалов, потому что это сильно влияет на конечный результат расчетов.

Благодарности

Исследование выполнено за счет средств гранта Российского научного фонда (проект № 22-19-00051), <https://rscf.ru/project/22-19-00051/>.

5. Список литературы

- [1] J.S. Williams, J.M. Poate, *Ion Implantation and Beam Processing*. Orlando: Academic, 1984.
- [2] А.Н. Диденко, А.Е. Лигачев, И.Б. Куракин, *Воздействие пучков заряженных частиц на поверхность металлов и сплавов*. Москва: Энергоатомиздат, 1987.
- [3] Ф.Ф. Комаров, *Ионная имплантация в металлы*. Москва: Металлургия, 1990.
- [4] Yu.P. Sharkeev, N.V. Girsova, E.V. Kozlov, O.B. Perevalova, I.G. Brown, X.Y. Yao, Dislocation structure in coarse-grained copper after ion implantation, *Nucl. Instr. Methods Phys. Res. B*, **106**, 532, 1995, doi: 10.1016/0168-583X(96)80034-6
- [5] I.A. Kurzina, E.V. Kozlov, Yu.P. Sharkeev, A.I. Ryabchikov, I.B. Stepanov, I.A. Bozhko, M.P. Kalashnikov, D.O. Sivin, S.V. Fortuna. Influence of ion implantation on nanoscale intermetallic-phase formation in Ti–Al, Ni–Al and Ni–Ti systems, *Surf. Coat. Technol.*, **201**, 8463, 2007, doi: 10.1016/j.surfcoat.2006.02.062
- [6] J.M. Poate, G. Foti, D.C. Jacobson, *Surface Modification and Alloying by Laser, Ion, and Electron Beams*. Berlin: Springer, 1983.
- [7] A. Shanaghi, P.K. Chu, Enhancement of mechanical properties and corrosion resistance of NiTi alloy by carbon plasma immersion ion implantation, *Surf. Coat. Technol.*, **365**, 52, 2019, doi: 10.1016/j.surfcoat.2018.04.027.
- [8] P. Budzyński, M. Kaminski, M. Turek, M. Wiertel. Impact of nitrogen and manganese ion implantation on the tribological properties of Stellite 6 alloy, *Wear*, **456**, 203360, 2020, doi: 10.1016/j.wear.2020.203360.
- [9] A.I. Ryabchikov, D.O. Sivin, O.S. Korneva, I.V. Lopatin, P.S. Ananin, N.A. Prokopenko, Y.K. Akhmadeev, High-current-density gas ion ribbon beam formation, *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. A*, **906**, 56, 2018, doi: 10.1016/j.nima.2018.07.088.
- [10] D.D. Zaytsev, A.I. Ivanova, A.V. Gurulev, High-Intensity Titanium Ion Implantation into Aluminum under Conditions of Repetitively-Pulsed Energy Impact of a Beam on the Surface, *Rus. Phys. J.*, **67**, 558, 2024, doi: 10.1007/s11182-024-03157-6.
- [11] A.I. Ryabchikov, High-Intensity Implantation With an Ion Beam's Energy Impact on Materials, *IEEE Trans. Plasma Science*, **49**, 2529, 2021, doi: 10.1109/TPS.2021.3073942

- [12] A.I. Ivanova, G.A. Bleykher, Numerical Simulation of Thermal Processes and the Effect of Heating of Near-Surface Layers of Titanium on the Diffusion Transfer of Dopants during High-Intensity Pulsed Ion Implantation, *J. Surf. Invest-X-RAY+*, **17**, 1458, 2023, doi: 10.1134/S1027451023060289
- [13] А.Г. Илларионов, А.А. Попов, *Технологические и эксплуатационные свойства титановых сплавов: учеб. пособие*. Екатеринбург: Изд-во Урал. ун-та, 2014.
- [14] С.Д. Столбов, *Закономерности изменения кристаллографической текстуры и физико-механических свойств сплавов на основе циркония в температурном интервале 20–1200 °С*. дис. канд. тех. наук., Москва, 2021.
- [15] Jr.R.E. Sanders, Aluminum and aluminum alloys, *Kirk-Othmer Encyclopedia of Chemical Technology*, New York: John Wiley & Sons, 2002.
- [16] Comsol Multiphysics, Heat Transfer Module User's Guide, Version 6.1. [online]; <https://doc.comsol.com/6.1/doc/com.comsol.help.heat/HeatTransferModuleUsersGuide.pdf>
- [17] В.Е. Люстерник, В.Э. Пелецкий, И.И. Петрова, Экспериментальное исследование калорических свойств реакторных материалов на основе циркония. Сплав Э-110, *Теплофизика высоких температур*, **31**, 560, 1993.
- [18] А.С. Займовский, А.В. Никулина, Н.Г. Решетников, *Циркониевые сплавы в ядерной энергетике*. Москва: Энергоатомиздат, 1994.
- [19] О.С. Коростин, А.В. Никулина, В.Э. Пелецкий, И.И. Петрова, Н.Н. Попов, Б.Н. Самсонов, Экспериментальное исследование калорических свойств сплава Zr–1%Nb при высоких температурах, *Теплофизика высоких температур*, **36**, 223, 1998.
- [20] M. Behúlova, E. Babalova, Numerical Simulation of Temperature Fields during Laser Welding–Brazing of Al/Ti Plates, *Materials*, **16**, 2258, 2023, doi: 10.3390/ma16062258
- [21] A. Fomin, V. Koshuro, A. Shchelkunov, A. Aman, M. Fomina, S. Kalganova, Simulation and experimental study of induction heat treatment of titanium disks, *Internat. J. Heat Mass Transfer*, **165**, 120668, 2021, doi: 10.1016/j.ijheatmasstransfer.2020.120668
- [22] С.В. Станкус, А.В. Багинский, О.И. Верба, А.М. Прокопьев, Р.А. Хайрулин, Коэффициенты теплопроводности нержавеющей стали 12X18H10T в широком интервале температур, *Теплофизика высоких температур*, **46**, 795, 2008.
- [23] В.Я. Чеховской, В.Д. Тарасов, И.В. Арсеев, Экспериментальное исследование теплоемкости и энтальпии сталей аустенитного класса 12X18H9T и 12X18H10T в интервале температур 300–1678 К, *Теплофизика высоких температур*, **39**, 450, 2001.
- [24] J.M. Woolman, R.A. Mottram, *The Mechanical and Physical Properties of the British Standard en Steels*. London: Pergamon Press, 1964.
- [25] И.С. Григорьев, Е.З. Мейлихов, *Физические величины, справочник*. Москва: Энергоатомиздат, 1991.
- [26] A.I. Ryabchikov, D.O. Vakhrushev, S.V. Dektyarev Features of the formation and diagnostics of powerful metal ion beams with submillisecond duration, *Nucl. Instr. Methods Phys. Res. A*, **1057**, 168711, 2023, doi: 10.1016/j.nima.2023.168711
- [27] Б.С. Бокштейн, *Диффузия в металлах*. Москва: Металлургия, 1978.