

ДИНАМИКА МЕТАЛЛОВ ПРИ ИМПУЛЬСНОМ ВОЗДЕЙСТВИИ ИНТЕНСИВНЫХ ПОТОКОВ ЭЛЕКТРОМАГНИТНОЙ ЭНЕРГИИ

Н.Б. Волков¹, Е.А. Жукова¹, Н.Д. Кундикова¹, А.Я. Лейви¹, А.Е. Майер²,
В.С. Седой³, К.А. Талала², Е.Л. Фенько², Н.А. Яворовский⁴, А.П. Яловец²

¹Институт электрофизики УрО РАН, Екатеринбург

²Южно-Уральский государственный университет, Челябинск

³Институт сильноточной электроники СО РАН, Томск

⁴Томский политехнический университет, Томск

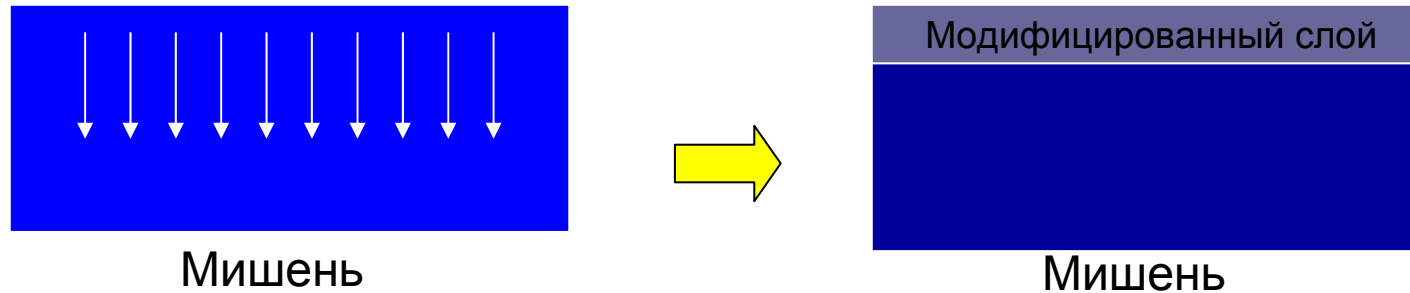
Работа поддерживается Министерством образования и науки РФ (госконтракт №02.513.11.3127), ИНТАС (проект №06-1000013-8949), РФФИ (проект №06-08-00355), РФФИ-Урал (проект №07-08-96032) и Президиумом УрО РАН в рамках целевой поддержки междисциплинарных исследований, выполняемых совместно учеными УрО, СО и ДВО РАН.

Рабочее совещание по физике неидеальной плазмы

Москва, 4-5 декабря 2007 г.

Схема эксперимента и параметры облучения.

e^- (ионные) пучки



1) Низкоэнергетические сильноточные электронные пучки:

$T_e \sim 0.5-40$ кэВ; $j_e \sim 100-500$ А/см²; $\tau \sim 1-50$ мкс.

2) Высокоэнергетические сильноточные электронные пучки:

$T_e \sim 0.1-1$ МэВ; $j_e \sim 1-1000$ кА/см²; $\tau \sim 30-100$ нс.

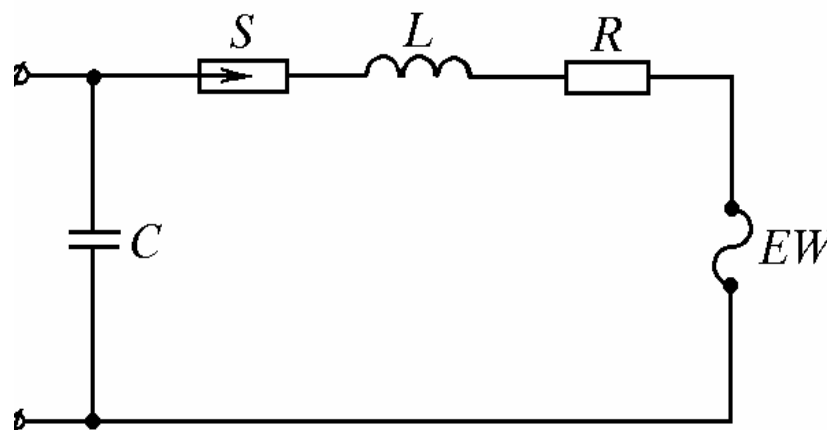
3) Ультракороткие высокоэнергетические электронные пучки: $T_e \sim 0.1-1$ МэВ, $j_e \sim 1-100$ кА/см², $\tau \leq 1$ нс.

4) Мощные ионные пучки (p; p+C; и др.):

$T_i \sim 0.1-2$ МэВ; $j_i \sim 50-1000$ А/см²; $\tau \sim 30-100$ нс.

5) Мощное лазерное излучение длительностью менее 1 ps.

Генерация наночастиц с помощью ЭВП в ИСЭ СО РАН



Эффективность использования энергии контура более 0.75

Производительность 50 ÷ 1000 г/час в зависимости от типа порошка

Теоретические исследования, проводимые в ИЭФ УрО РАН и ЮУрГУ направлены на:

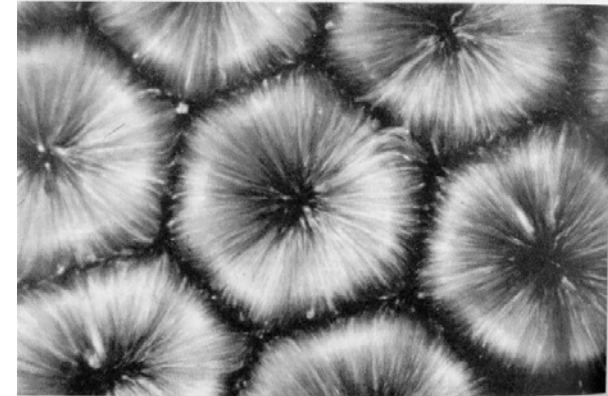
- 1. Получение широкодиапазонных выражений для термодинамических и транспортных характеристик металла при высоких плотностях энергии в одно- и двухтемпературном приближении;**
- 2. Моделирование взаимодействия мощных пучков заряженных частиц и лазерного излучения с металлом различной длительности с целью исследования нелинейных механизмов преобразования энергии, кратерообразования, неустойчивостей, перемешивания поверхностных слоев мишени;**
- 3. Моделирование и исследование нелинейных физических механизмов возбуждения и релаксации сильно неравновесных состояний металла (плазмы твердотельной плотности);**
- 4. Разработку физико-математических моделей разрушения проводников электрическим током большой плотности и генерации наночастиц;**
- 5. Моделирование динамики разлета продуктов ЭВП в буферный газ с учетом процессов конденсации и испарения.**

Экспериментальные исследования, планируемые и проводимые в ИЭФ УрО РАН и ЮУрГУ направлены на установление физических механизмов возбуждения и релаксации сильно неравновесных состояний в металле при воздействии мощных импульсов лазерного и электронного излучения длительностью менее 1 нс.

Моделирование перемешивания при облучении многослойных мишеней микросекундным электронным пучком. Механизмы конвекции:

Конвекция в неоднородной среде в поле сил тяжести $\rho=\rho(T)$ (существенна в закритическом режиме)

- Термокапиллярный механизм $\sigma=\sigma(T)$
Необходимые условия
Наличие свободной границы, градиент температуры на которой направлен вглубь мишени.
- Термоэлектрический механизм $\varepsilon=\varepsilon(T)$
(существенен для полупроводников и диэлектриков)

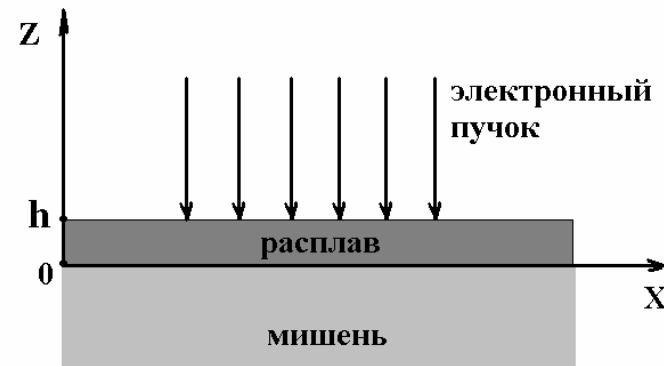


Ячейки Бенара

Система уравнений Буссинеска в переменных завихренность – функция тока в двумерных декартовых координатах.

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \xi}{\partial t} + (\vec{v} \nabla \xi) = \nu \Delta \xi + \beta g \frac{\partial T}{\partial x} \\ \frac{\partial T}{\partial t} + (\vec{v} \nabla T) = \chi \Delta T \\ \psi = -\Delta \xi \\ \xi = [\nabla, \vec{v}]|_y \\ v_x = -\frac{\partial \psi}{\partial z}; v_z = \frac{\partial \psi}{\partial x} \end{array} \right.$$

$$\beta = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial T}$$



$$z = 0: \psi = 0, \quad \xi = 0, \quad T = T_0$$

$$z = h: \psi = 0; \quad \xi = -\frac{1}{\nu \rho} \frac{\partial T}{\partial x}; \quad \frac{\partial T}{\partial z} = 0.$$

На поверхности расплава $z=h$ накладывается гармоническое возмущение температуры $\delta T = \cos(2\pi x/\lambda)$

Алгоритм моделирования **конвективного течения**

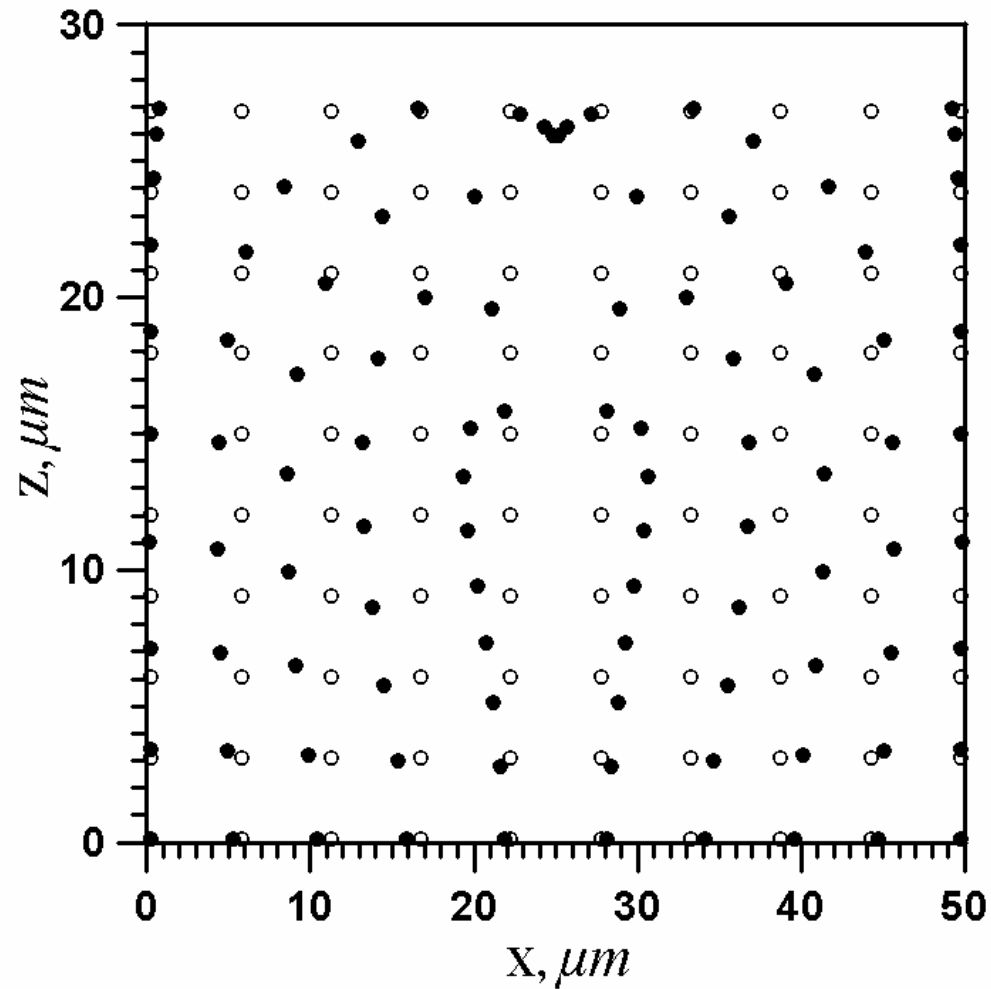
1) Расчет поля температур по глубине мишени и агрегатного состояния вещества на момент окончания импульса по программному комплексу ВЕТАIN1.

2) Расчет динамики гармонических возмущений

Термокапиллярная конвекция

$T_e=200$ кэВ, $W=30$ Дж/см², $\tau=5$ мкс,

$\lambda=54$ мкм, $\delta T_0=30$ К.

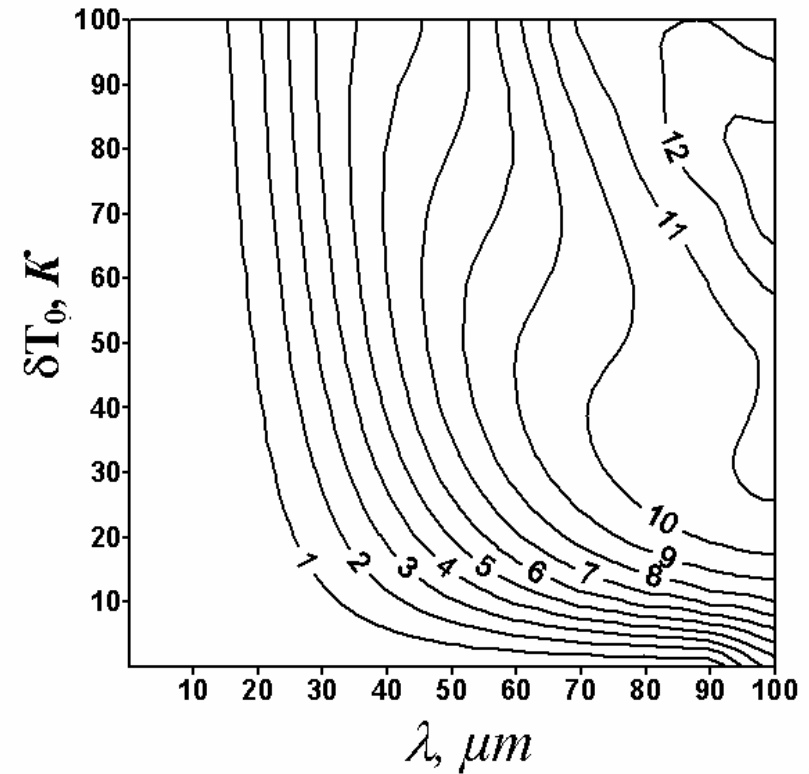
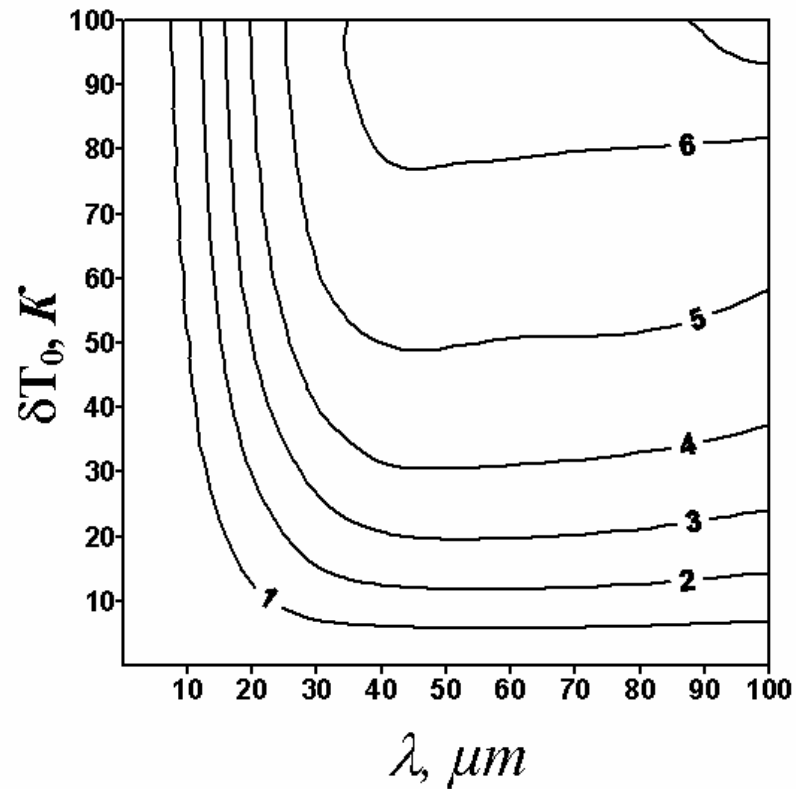


Положение лагранжевых точек.

• - начальное положение, \circ - конечное положение

Максимальное смещение u_z

для различных длин волн λ и амплитуд δT_0
возмущения температуры на поверхности расплава

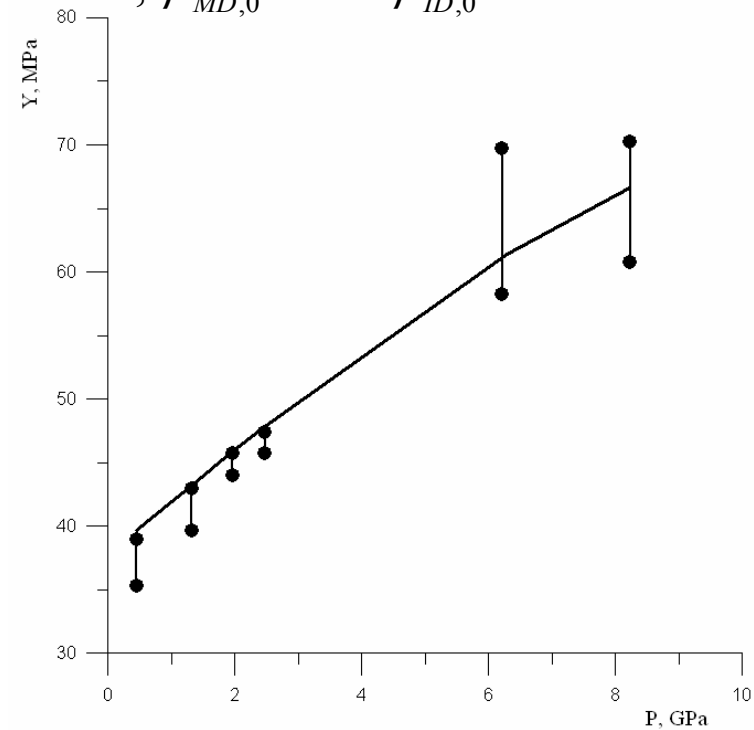
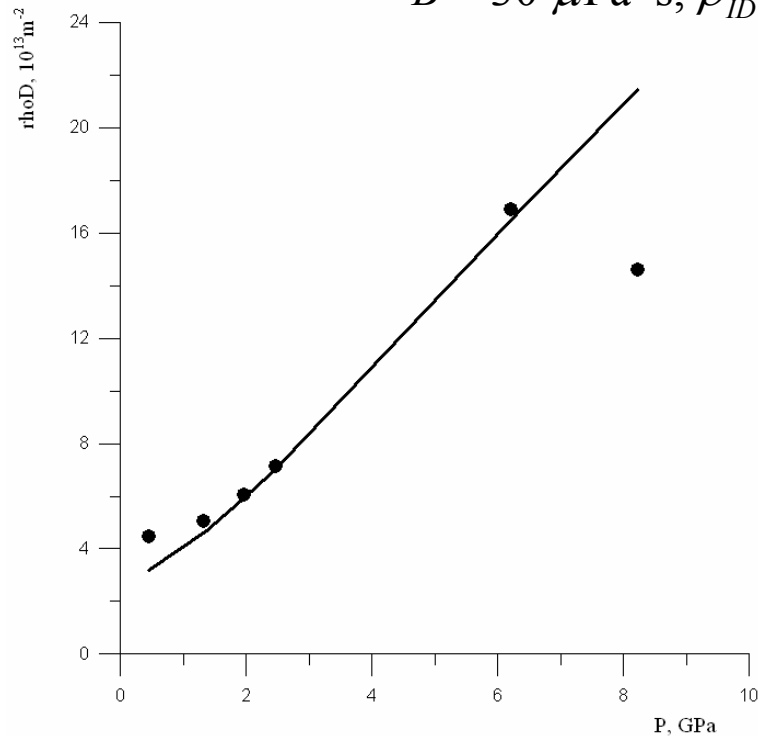


цифры: смещение в мкм

Моделирование динамики дислокаций и их влияния на свойства металла (в работе принимает участие аспирант ЧелГУ Красников В.С.).

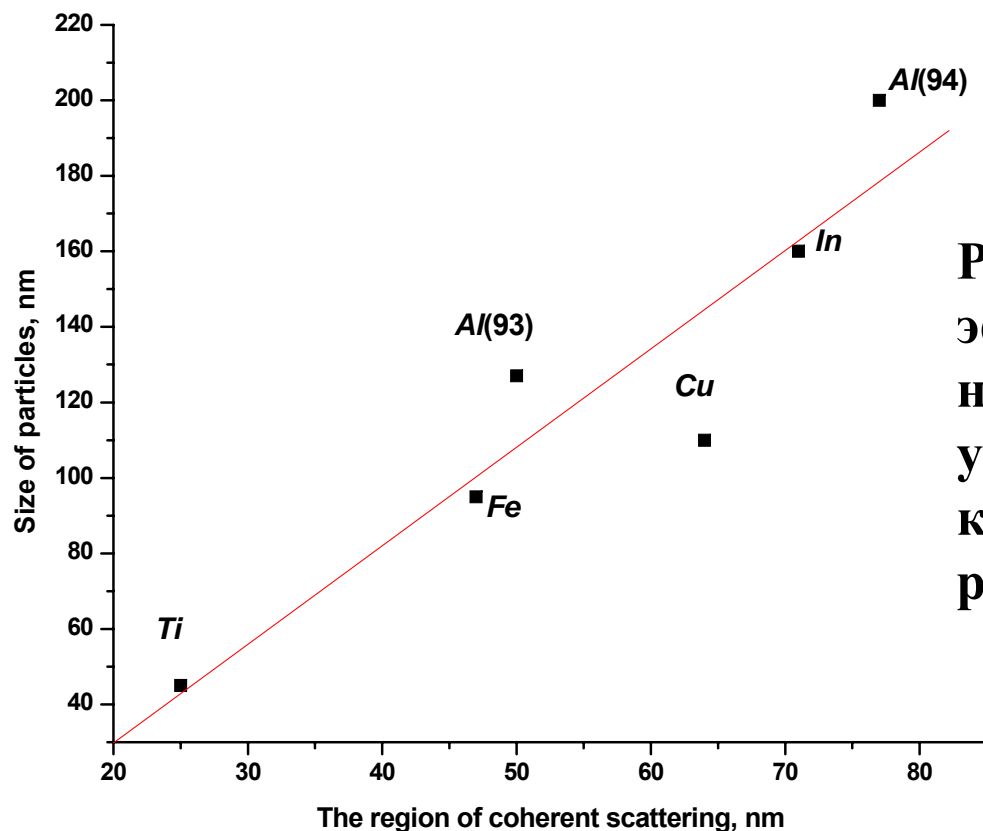
Модель включает себя уравнения механики сплошной среды, кинетики и динамики дислокаций. На рисунках показаны зависимости плотности дислокаций и предела текучести от амплитуды ударной волны в Al (точки – экспериментальные данные [Т. Свенсон. // Ударные волны и явления высокоскоростной деформации металлов. /Под редакцией Мейерса М.А. и Мурра Л.Е. Металлургия. 1984. С.164.]):

$$\rho_0 = 2.7 \text{ g/cm}^3, \mu = 26 \text{ GPa}, Y_0 = 22 \text{ MPa}, b = 0.3 \text{ nm},$$
$$B = 30 \text{ }\mu\text{Pa}\cdot\text{s}, \rho_{ID,0} = 2.56 \cdot 10^{13} \text{ m}^{-2}, \rho_{MD,0} = 0.01 \rho_{ID,0}.$$

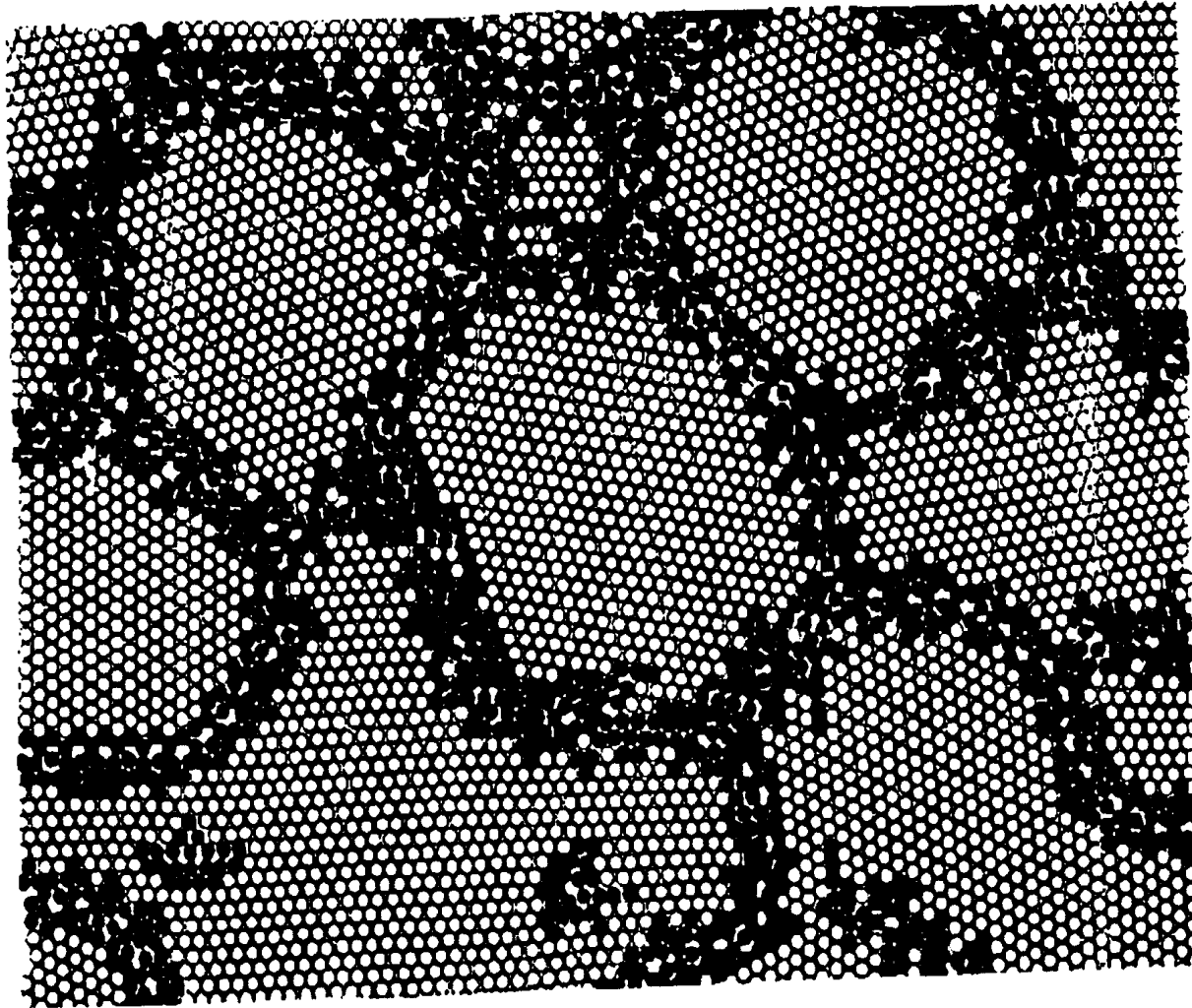


Механизмы разрушения металлических проводников электрическим током большой плотности

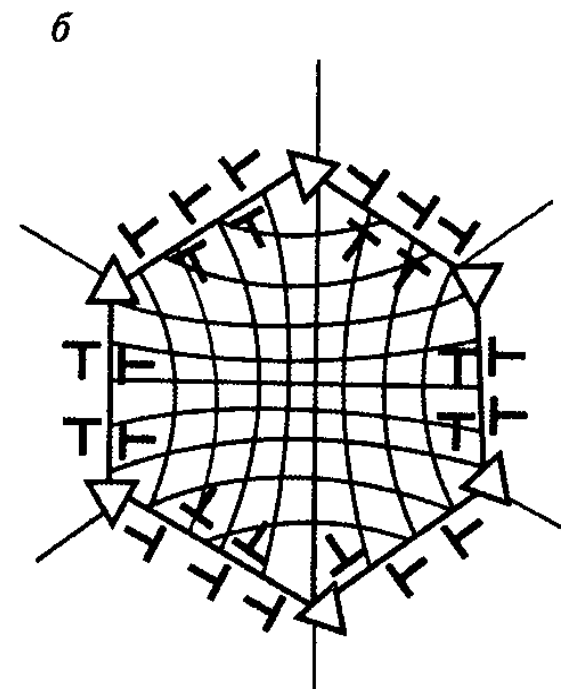
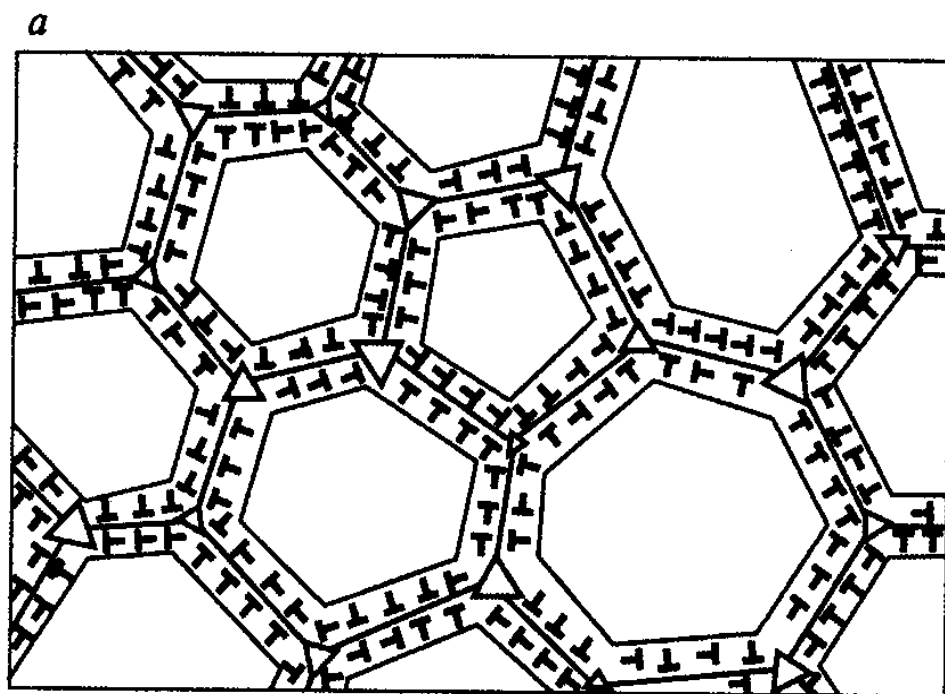
Металлические проволочки, используемые при ЭВП, поликристаллические. Средний размер кристаллитов в зависимости от ее материала, толщины и способа получения может быть $d \leq 100$ нм.



Размер частиц, определенной по эффективной площади наночастиц, уменьшается при уменьшении размера области когерентного рассеяния (среднего размера кристаллита).



Двумерная модель атомной структуры нанокристаллического материала, рассчитанная с использованием потенциала Морзе: о – атомы кристаллитов, • - атомы границ раздела, смещенные относительно узлов идеальной кристаллической решетки более чем на 10%; все атомы химически идентичны [Н. Gleiter. // *Nanostruct. Mater.*, 1995. V. 6. No. 1-4. P.3.].



Схематическое представление наноструктурного материала со средним размером зерен около 100 нм (а) (треугольнички разного размера и ориентации обозначают дисклинации различной мощности и знака), где вблизи неравновесных границ зерен формируются упруго-искаженные области, и зернограницные дефекты и искажения кристаллической решетки в наноструктурном материале с размером зерен 10-20 нм (б) [Р.З. Валиев, И.В. Александров. Объемные наноструктурные металлические материалы.-М.: ИКЦ «Академкнига, 2007].

Удельное сопротивление поликристаллической проволоочки с учетом рассеяния электронов проводимости на границах кристаллитов может быть оценено по формуле, полученной в работе [A.F. Mayadas, M. Shatzkes. //Phys. Rev. B, 1970. V. 1. No.4. P.1382-1389.]:

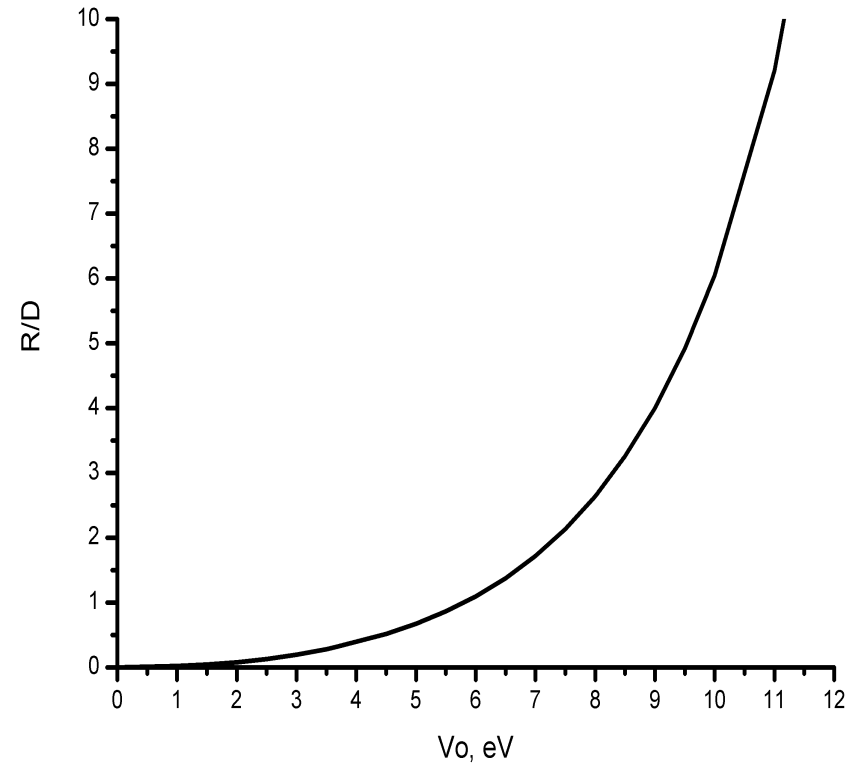
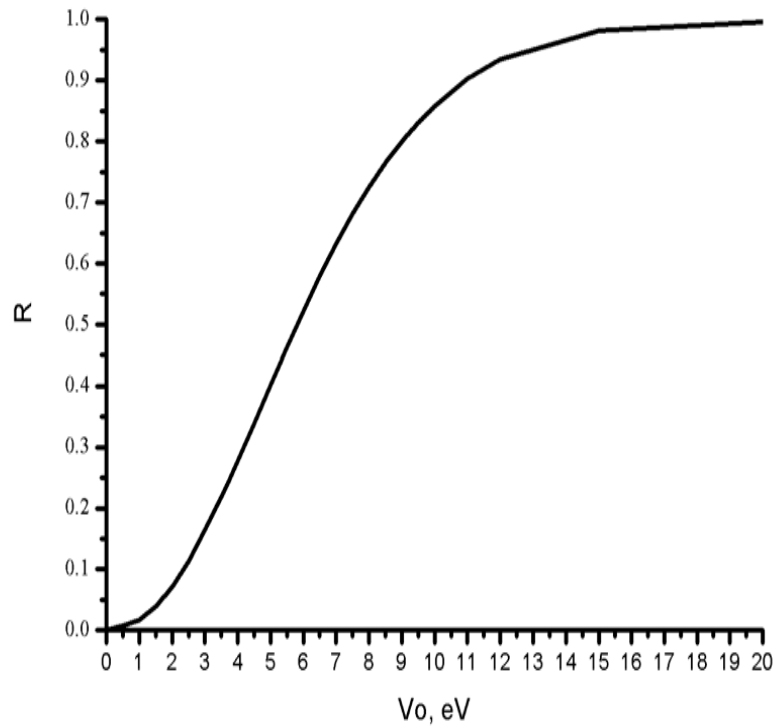
$$\frac{\rho_0}{\rho_g} = 1 - \frac{3}{2}\alpha + 3\alpha^2 - 3\alpha^3 \ln\left(1 + \frac{1}{\alpha}\right), \quad (\text{I})$$

где ρ_g, ρ_0 -удельное сопротивление проволоочки с учетом и без учета размерного эффекта, соответственно; $\alpha = l_0 R / dD$; l_0 - длина свободного пробега электрона без учета рассеяния на границах кристаллитов; $R, D = 1 - R$ - соответственно, коэффициент зеркального отражения и прозрачность потенциального барьера, моделирующего границу кристаллита. При $\alpha \gg 1$ **справедлива асимптотика**

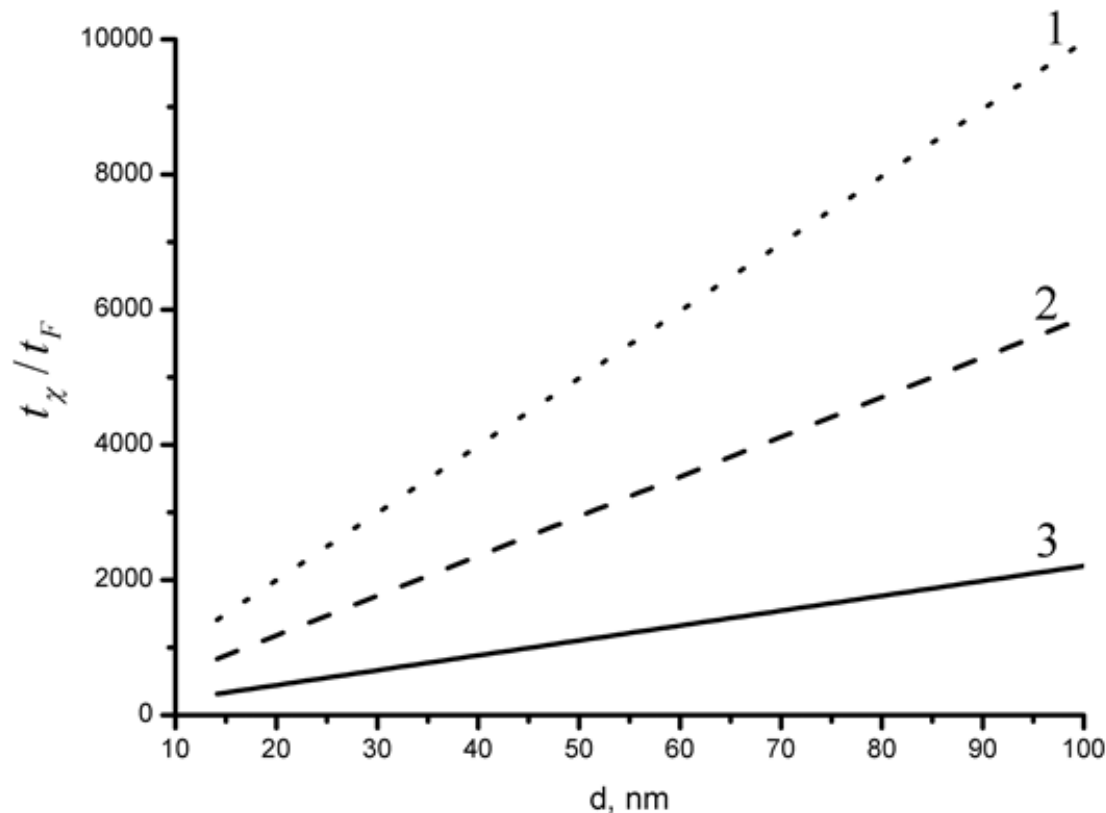
$$\rho_g = 4\alpha\rho_0 / 3. \quad (\text{II})$$

Формула (I), как показано в [Р.З. Валиев, И.В. Александров. Объемные наноструктурные металлические материалы.-М.: ИКЦ «Академкнига, 2007], при $R = 0.23$ удовлетворительно описывает сопротивление проводников с размером кристаллитов от 300 нм до 13 мкм.

Зависимости R и R/D от высоты потенциального барьера, полученные численным решением задачи о рассеянии электрона (волнового пакета шириной 2 \AA) с энергией Ферми на потенциальном барьере шириной 3 \AA .



В случае $\alpha \gg 1$ выравнивание температуры по кристаллиту определяется не электронной, а фононной теплопроводностью (!), которая пропорциональна $1/T$.



Отношение характерного времени выравнивания температуры по кристаллиту к времени пробега электрона с энергией Ферми через кристаллит в зависимости от его размера для меди: 1 – $T = 1356$ К; 2 – $T = 800$ К; 3 – $T = 300$ К.

Вывод: проводник с размером кристаллитов меньшим 100 нм к моменту взрыва можно рассматривать как гетерогенную среду с существенно неоднородным распределением температуры.

Моделирование разлета продуктов ЭВП: основные положения модели

1. Средний по объему **тензор деформации** гетерогенной смеси:

$$u_{ik} = \sum_j \alpha^{(j)} u_{ik}^{(j)}$$

2. Средний по объему **тензор скоростей деформации** гетерогенной смеси:

$$v_{ik} = \sum_j \alpha^{(j)} v_{ik}^{(j)}$$

3. Все компоненты равноправны и движутся в одном и том же поле напряжений. Обычно рассматривают линейную зависимость тензора напряжений от тензора деформации, тогда **тензор напряжений** имеет вид:

$$\sigma_{ik} = \sum_j \alpha^{(j)} \sigma_{ik}^{(j)}$$

4. **Давление** гетерогенной смеси:

$$P = \sum_j \alpha^{(j)} P^{(j)}$$

5. **Элементарная работа**, совершаемая при деформации гетерогенной среды в единицу времени в единице объема гетерогенной смеси:

$$\dot{A} = \sigma_{ik} v_{ik} = \sum_j \alpha^{(j)} \sigma_{ik}^{(j)} v_{ik} = \sum_j \dot{A}^{(j)}$$

6. **Работа j-компоненты**, совершаемая над всей гетерогенной средой в единицу времени в единице объема:

$$\dot{A}^{(j)} = \alpha^{(j)} \sigma_{ik}^{(j)} v_{ik}$$

Система уравнений механики гетерогенных сред

Уравнения механики гетерогенных сред записаны с учетом теплопроводности в отсутствии обмена теплом между компонентами через межфазную поверхность и в отсутствии фазовых превращений. Эти процессы учитываются добавлением соответствующих слагаемых в сформулированные ниже уравнения:

Уравнение **непрерывности** для m -компоненты:

$$\frac{\partial \rho^{(m)}}{\partial t} + \nabla \left(\rho^{(m)} \vec{v}^{(m)} \right) = 0$$

Уравнение **движения** для m -компоненты:

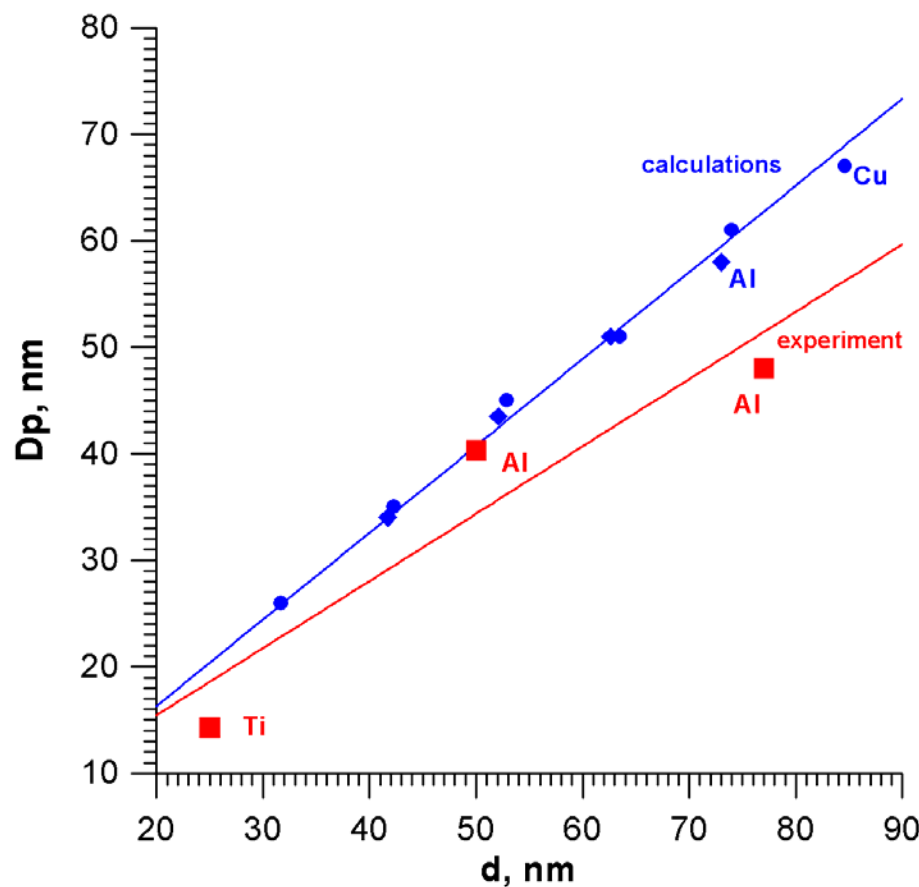
$$\rho^{(m)} \left(\frac{\partial v_i^{(m)}}{\partial t} + \left(v_k^{(m)} \frac{\partial}{\partial x_k} \right) v_i^{(m)} \right) = \alpha^{(m)} \frac{\partial \sigma_{ik}}{\partial x_k}$$

Уравнение **внутренней энергии** для m -компоненты:

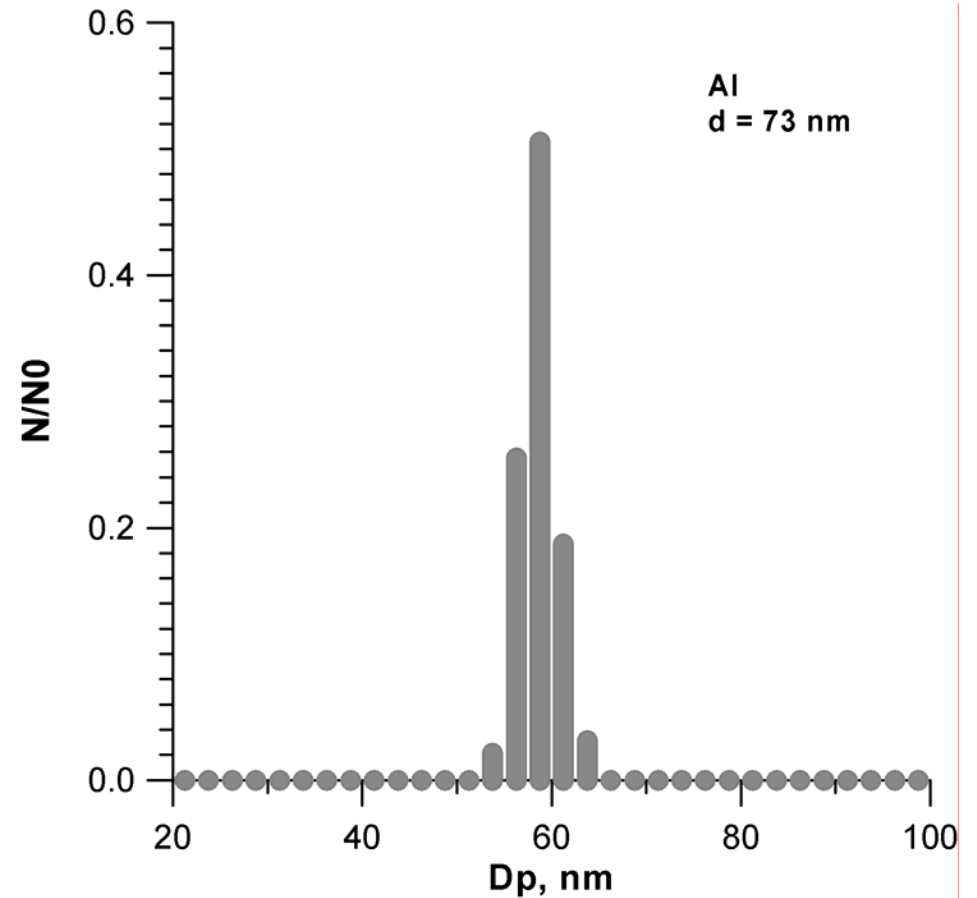
$$\rho^{(m)} \left(\frac{\partial U^{(m)}}{\partial t} + \left(v_k \frac{\partial}{\partial x_k} \right) U^{(m)} \right) = \alpha^{(m)} \sigma_{ik}^{(m)} v_{ik} + \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\alpha^{(m)} \kappa^{(m)} \frac{\partial T^{(m)}}{\partial x_k} \right)$$

Система уравнений решается в системе координат, связанной с движением центра масс всей смеси совместно с уравнениями кинетики конденсации и испарения наночастиц.

Результаты моделирования разлета продуктов ЭВП с учетом кинетики испарения и конденсации



Экспериментальные и расчетные точки соответствуют средне численному размеру частиц.



Теоретическая гистограмма распределения частиц по размерам.

Вывод

Таким образом, можно считать доказанным, что:

1. Разрушение наноструктурного проводника электрическим током большой плотности происходит по межкристаллитным границам;
2. Размер металлических наночастиц, получаемых при разлете продуктов ЭВП в буферный (инертный) газ, определяется распределением кристаллитов по размерам в проволочке.