

P11-2001-164

И.В.Амирханов, Е.В.Земляная, И.В.Пузынин,
Т.П.Пузынина, И.Сархатов¹

**ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ФАЗОВЫХ
ПЕРЕХОДОВ В МЕТАЛЛАХ, ОБЛУЧАЕМЫХ
ИМПУЛЬСНЫМИ ПУЧКАМИ ИОНОВ²**

¹Таджикский государственный национальный университет, Душанбе

²Работа поддержана РФФИ, гранты № 99-01-01101, № 0001 00617

1. Введение

Облучение тонких пленок мощными импульсными электронными и ионными пучками может создавать в поверхностных слоях совершенно новые структуры с очень интересными для практических целей физико-химическими свойствами [1-8]. Взаимодействие пучков заряженных частиц с поверхностью металлов и сплавов (поверхностью среды) способно вызвать фазовые переходы, а также поле напряжений во всей облучаемой среде. При воздействии заряженных частиц на поверхность твердых тел существует ряд каналов образования упругих напряжений [3].

Изучение процессов теплопроводности при наличии в системах фазовых переходов (процессы плавления и затвердевания материалов) в значительной мере усложняется тем, что математические модели этих процессов представляют собой нелинейные краевые задачи. Теоретическое рассмотрение динамики фазовых переходов первого рода приводит к различным вариантам задачи Стефана [9,10]. При численном решении этой задачи нередко используется модификация исходного уравнения, в которой влияние фазового перехода учитывается с помощью сингулярной добавки к теплоемкости в точке фазового перехода [11-13].

В работах [14-16] исследуется модель эволюции термоупругих волн под воздействием импульсного потока ионов.

В настоящей работе в рамках той же модели исследуется динамика фазовых переходов (скорость движения фазовой границы, глубина проплава или затвердевания) первого рода (в рамках задачи Стефана) в зависимости от формы и мощности источника. В работе представлена постановка задачи и метод ее численного решения. Обсуждаются вопросы точности вычислительных схем и результаты численных экспериментов.

2. Исходные уравнения

Моделирование динамики фазовых переходов типа плавления или затвердевания приводит к задаче Стефана для фазовых переходов первого рода. Решение этой задачи сводится к решению уравнения теплопроводности в области с неизвестной подвижной границей $\xi = \xi(t)$, которая разделяет твердую и жидкую фазы:

$$\rho_i c_{pi} \frac{\partial T_i}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} (\lambda_i \frac{\partial T_i}{\partial x}) + Q_i; \quad i = 1, 2, \quad (1)$$

где $\rho_i c_{pi}$ – объемная теплоемкость, λ_i – коэффициент теплопроводности и Q_i – объемная мощность тепловых источников. Пусть $i = 1$ – жидкая фаза, $i = 2$ – твердая фаза. На межфазовой границе $\xi = \xi(t)$ выполняется так называемое условие Стефана:

$$\lambda_2 \frac{\partial T_2}{\partial x} - \lambda_1 \frac{\partial T_1}{\partial x} = \rho_2 L \dot{\xi}, \quad (2)$$

где $\dot{\xi} = v$ – скорость движения фазовой границы, L – удельная теплота плавления металла.

Кроме соотношения (2), на межфазовой границе задается еще одно условие:

$$T_1 = T_2 = T_{\text{пл}}, \quad (3)$$

где $T_{\text{пл}}$ – температура плавления (или затвердевания), которую во многих случаях можно считать постоянной величиной. Задача (1)-(3) дополняется соответствующими граничными и начальными условиями.

Так как в настоящей работе исследуется фазовый переход в образце железа под действием мощного импульсного ионного пучка [16], то удобно перейти к следующим безразмерным величинам и независимым переменным:

$T = T/T_0$ ($T_0 = 293$ К) – температура, $x = x/l_0$ ($l_0 = 10^{-5}$ м – толщина облучаемого образца) – расстояние от поверхности образца, время $t = t/\tau$ ($\tau = 3 \cdot 10^{-7}$ с – время действия источника), $x_1 = R_0/l_0$ ($R_0 = 7 \cdot 10^{-7}$ м – свободная длина пробега ионов) – глубина проникновения ионов в образец.

Далее решение задачи разбиваем на два этапа.

На первом этапе решаем задачу

$$\frac{\partial T}{\partial t} = k_0 \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + q(x, t), \quad 0 < x < 1, \quad 0 < t \leq t_{\text{пл}}, \quad (4)$$

с начальными и граничными условиями

$$T(x, 0) = 1, \quad 0 \leq x \leq 1; \quad \frac{\partial T}{\partial x} \Big|_{x=0} = \frac{\partial T}{\partial x} \Big|_{x=1} = 0, \quad t > 0, \quad (5)$$

где $t_{\text{пл}}$ – момент начала плавления, который определяется из условия $T(0, t_{\text{пл}}) = T_{\text{пл}}$.

На втором этапе задача формулируется следующим образом:

$$e \frac{\partial T_1}{\partial t} = k_0 \frac{\partial^2 T_1}{\partial x^2} + q(x, t), \quad 0 < x < \xi(t), \quad (6)$$

$$\frac{\partial T_2}{\partial t} = k_0 \frac{\partial^2 T_2}{\partial x^2} + q(x, t), \quad \xi(t) < x < 1, \quad (7)$$

с граничными условиями

$$\frac{\partial T_1}{\partial x} \Big|_{x=0} = 0, \quad \frac{\partial T_2}{\partial x} \Big|_{x=1} = 0 \quad (8)$$

и условиями Стефана

$$T_1 \Big|_{x=\xi} = T_2 \Big|_{x=\xi} = T_{\text{пл}}, \quad (9)$$

$$\frac{\partial T_2}{\partial x} \Big|_{x=\xi} - \frac{\partial T_1}{\partial x} \Big|_{x=\xi} = A \frac{d\xi}{dt}, \quad (10)$$

где

$$e = \frac{c_1 \rho_1}{c_2 \rho_2}, \quad A = \frac{\rho_2 L l_0^2}{\lambda_2 T_0 \tau}, \quad k_0 = \frac{\lambda_2 \tau}{\rho_2 c_2 l_0^2}.$$

Мы будем исследовать рассматриваемую модель в приближении $\lambda_1 = \lambda_2 = \lambda$. Кроме того, предположим, что образец нагревается источником со стороны $x = 0$.

Функция $q(x, t)$, описывающая влияние пучка заряженных частиц на образец (функция источника), определяется следующим выражением [16]:

$$q(x, t) = q_0 q(x, t),$$

где

$$q_0 = \frac{E_0 j_{\max}}{2ZeR_0} \frac{\tau}{c_2 \rho_2 T_0} \quad (11)$$

безразмерная постоянная, которая выражает мощность теплового источника, E_0 , j_{\max} , Ze – энергия, плотность тока и заряд ионов соответственно. Функция $\tilde{q}(x, t)$ описывает форму и способ воздействия источника и задается из физических соображений, с учетом характеристик пучка и свойств мишени; $\tilde{q}(x, 0) = 0$ при $0 \leq x \leq 1$, т.е. при $t = 0$ пучок частиц еще не действует на мишень. Как и в работе [16], будем пользоваться следующими источниками $\tilde{q}(x, t)$:

$$\tilde{q}(x, t) = q_1(x) q_2(t), \quad (12)$$

где $q_1(x)$ – потери энергии ионом как функция от координаты x , $q_2(t)$ – временная зависимость плотности тока ионов:

1.

$$q_1(x) = \begin{cases} 1, & \text{при } 0 \leq x < x_1, \\ 0, & \text{при } x_1 \leq x \leq 1; \end{cases}$$

$$q_2(t) = \begin{cases} 1, & \text{при } 0 < t < 1, \\ 0, & \text{при } 1 \leq t < \infty. \end{cases} \quad (13)$$

2.

$$q_1(x) = \frac{1}{1 + e^{\mu_1(x - x_1)}}, \quad 0 \leq x \leq 1;$$

$$q_2(t) = \begin{cases} 0, & t = 0, \\ \frac{1}{1 + e^{\mu_2(t - 1)}}, & 0 < t < \infty. \end{cases} \quad (14)$$

Через некоторое время после начала плавления при $t = 1$ источник выключается, но плавление еще будет продолжаться из-за диффузного поступления потока тепла от более нагретой части образца к менее нагретой. Затем наступит обратный процесс – кристаллизация. При кристаллизации во втором условии Стефана (10) L (поглощение теплоты) заменяется на $-L$ (выделение теплоты), а ρ_2 – на ρ_1 .

3. Метод численного решения

Для решения систем уравнений (4)-(5), (6)-(10) используем конечно-разностный метод. Введем равномерную прямоугольную сетку $\{x_i = ih_x (i = 0, 1, \dots, m), t_j = jh_t (j = 0, 1, \dots, n)\}$; h_x и h_t – соответственно шаги по переменным x и t . При этом используем следующую неявную схему [17]:

$$e_i \frac{T_i^{j+1} - T_i^j}{h_t} = k_0 \Lambda [\sigma T_i^{j+1} + (1 - \sigma) T_i^j] + q_i^{j+\frac{1}{2}}, i = 1, \dots, m - 1, \quad (15)$$

$$\sigma \frac{T_1^{j+1} - T_0^{j+1}}{h_x} + (1 - \sigma) \frac{T_1^j - T_0^j}{h_x} - \frac{h_x}{2k_0} \left(\frac{T_0^{j+1} - T_0^j}{h_t} - q_0^{j+\frac{1}{2}} \right) = 0; i = 0, \quad (16)$$

$$\sigma \frac{T_m^{j+1} - T_{m-1}^{j+1}}{h_x} + (1 - \sigma) \frac{T_m^j - T_{m-1}^j}{h_x} + \frac{h_x}{2k_0} \left(\frac{T_m^{j+1} - T_m^j}{h_t} - q_m^{j+\frac{1}{2}} \right) = 0; i = m, \quad (17)$$

$$e_i = 1; T_i^0 = 1; i = 0, 1, \dots, m, \quad (18)$$

где

$$\Lambda T_i = \frac{T_{i+1} - 2T_i + T_{i-1}}{h_x^2}; q_i^{j+\frac{1}{2}} = q(ih_x, t_j + 0, 5h_t).$$

При $\sigma = 0,5$ схема является безусловно устойчивой и имеет порядок аппроксимации $O(h_x^2 + h_t^2)$.

После начала плавления нам надо найти неизвестную кривую $\xi = \xi(t)$, которая является границей между жидкой и твердой фазами (задача (6)-(10)). Задача (6)-(10) аппроксимируется исходной дискретной схемой (15)-(18) с добавлением дискретной аппроксимации условий Стефана, которая имеет вид

$$T_l^{j+1} = T_{пл}, \quad (19)$$

$$\frac{4T_{l-1}^{j+1} - T_{l-2}^{j+1} - 3T_l^{j+1}}{2h_x} + \frac{4T_{l+1}^{j+1} - T_{l+2}^{j+1} - 3T_l^{j+1}}{2h_x} = A \frac{h_x}{h_t}, \quad (20)$$

где l – неизвестный номер узла дискретной сетки по x , в котором на данном j -м слое выполняются условия (19)-(20). Здесь предполагается, что на каждом j -м слое межфазовая граница перемещается ровно на один шаг h_x в сторону возрастания (при плавлении) либо в сторону убывания (при кристаллизации), т.е. номер l может меняться на каждом j -м слое не больше, чем на 1. Шаг по времени h_t является переменным и определяется на каждом j -м слое из дискретных условий Стефана (19)-(20).

Если до плавления $e_i = 1$ при $i = 0, 1, \dots, m$, то при плавлении $e_i = e$ при $i < l$ и $e_i = 1$ при $i > l$.

Для нахождения h_t на каждом временном слое используем метод встречной прогонки. Для этого по известным значениям левых и правых прогоночных коэффициентов $\vec{V}_0, \vec{U}_0, \vec{V}_m, \vec{U}_m$:

$$\vec{V}_0 = a/(e + a), \vec{U}_0 = \vec{V}_0 [T_1^j - T_0^j + (eT_0^j + q_0^{j+\frac{1}{2}}h_t)/a],$$

$$\bar{V}_m = a/(1+a), \quad \bar{U}_m = \bar{V}_m(T_{m-1}^j - T_m^j + T_m^j/a),$$

которые определяются из дискретных граничных условий (16)-(17), находим значения левых и правых прогоночных коэффициентов \bar{V}_i, \bar{U}_i ($i = 1, 2, \dots, l-1$), \bar{V}_i, \bar{U}_i ($i = m, m-1, \dots, l+1$) из следующих рекуррентных соотношений:

$$\bar{V}_i = \frac{1}{b_1 - \bar{V}_{i-1}}; \quad \bar{U}_i = \bar{V}_i(\bar{U}_{i-1} + 2F_i/a); \quad i = 1, 2, \dots, l-1.$$

$$\bar{V}_i = \frac{1}{b - \bar{V}_{i+1}}; \quad \bar{U}_i = \bar{V}_i(\bar{U}_{i+1} + 2F_i/a); \quad i = m-1, m-2, \dots, l+1.$$

Здесь

$$a = k_0 h_t / h_x^2, \quad b_1 = 2(1 + e/a), \quad b = 2(1 + 1/a),$$

$$F_i = e_i T_i^j + a(T_{i+1}^j - 2T_i^j + T_{i-1}^j)/2 + q_i^{j+\frac{1}{2}} h_t.$$

Теперь выразим $T_{l\pm 1}^{j+1}, T_{l\pm 2}^{j+1}$ через коэффициенты встречной прогонки $\bar{U}_{l+1}, \bar{V}_{l+1}, \bar{U}_{l+2}, \bar{V}_{l+2}, \bar{U}_{l-1}, \bar{V}_{l-1}, \bar{U}_{l-2}, \bar{V}_{l-2}$ и температуру T_l^{j+1} :

$$T_{l+1}^{j+1} = \bar{V}_{l+1} T_l^{j+1} + \bar{U}_{l+1},$$

$$T_{l+2}^{j+1} = \bar{V}_{l+2}(\bar{V}_{l+1} T_l^{j+1} + \bar{U}_{l+1}) + \bar{U}_{l+2},$$

$$T_{l-1}^{j+1} = \bar{V}_{l-1} T_l^{j+1} + \bar{U}_{l-1},$$

$$T_{l-2}^{j+1} = \bar{V}_{l-2}(\bar{V}_{l-1} T_l^{j+1} + \bar{U}_{l-1}) + \bar{U}_{l-2}.$$

Тогда из условий Стефана (19)-(20) получим следующее нелинейное уравнение для нахождения неизвестного шага h_t :

$$T_{пл} - \frac{2Ah_x^2/h_t - 4(\bar{U}_{l+1} + \bar{U}_{l-1}) + \bar{U}_{l-1}\bar{V}_{l-2} + \bar{U}_{l+1}\bar{V}_{l+2} + \bar{U}_{l+2} + \bar{U}_{l-2}}{4(\bar{V}_{l+1} + \bar{V}_{l-1}) - \bar{V}_{l-1}\bar{V}_{l-2} - \bar{V}_{l+1}\bar{V}_{l+2} - \bar{U}_{l+2} - \bar{U}_{l-2} - 6} = 0. \quad (21)$$

Решая это уравнение относительно h_t , находим точку плавления $t_{j+1} = t_j + h_t, x_l = lh_x$, а затем по известным значениям T_l^{j+1} и значениям прогоночных коэффициентов находим температуру во всех точках по формулам

$$T_i^{j+1} = \bar{V}_i T_{i+1}^{j+1} + \bar{U}_i, \quad i = l-1, l-2, \dots, 0;$$

$$T_i^{j+1} = \bar{V}_i T_{i-1}^{j+1} + \bar{U}_i, \quad i = l+1, l+2, \dots, m.$$

После выключения источника из-за диффузии тепла некоторое время плавление будет продолжаться, а потом начнется процесс кристаллизации. Как уже отметили, если при плавлении после каждого шага по времени h_t увеличивали l на единицу ($l = l+1$), то при кристаллизации l следует уменьшать ($l = l-1$) и в условии Стефана (21) заменить A на $-A$.

Таким образом, алгоритм решения задачи (15)-(20) следующий. Пока $T_0^j < T_{пл}$, мы решаем задачу (15)-(18) с постоянным шагом h_t . На каждом j -м слое система уравнений (15)-(17) решается методом прогонки. Когда температура достигает точки плавления, т.е. $T_0^j \geq T_{пл}$, шаг h_t становится переменным и вычисляется на каждом слое из уравнения (21). Признаком наступающей кристаллизации является то, что при каком-то номере l уравнение (21) не имеет решения. После замены A на $-A$ и ρ_2 на ρ_1 и при дальнейшем уменьшении l уравнение (21) будет иметь решения, которые соответствуют кристаллизации.

Отметим, что критерием поворота функции $\xi(t)$ может также служить близость к нулю ее производной $\xi'(t)$ или, в дискретном представлении,

$$\frac{\xi^{j+1} - \xi^j}{h_t} = \frac{h_x}{h_t} < \varepsilon,$$

где $\varepsilon > 0$ – заданное малое число.

4. Проверка точности вычислительной схемы

Для проверки точности схемы проводился численный эксперимент для задачи (4)-(5) для источников (13)-(14) ($q_0 = 59,44$; $k_0 = 6,54 \cdot 10^{-2}$; $x_1 = 0,07$; $\mu_1 = \mu_2 = 100$) на сгущающихся сетках при начальных $h_x = 0,001$ и $h_t = 0,001$. При этом для источника (14), являющегося непрерывной функцией, $\max|T_{h_x}(x, 1) - T_{h_x/2}(x, 1)| = 2,83 \cdot 10^{-5}$, $\max|T_{h_x/2}(x, 1) - T_{h_x/4}(x, 1)| = 1,07 \cdot 10^{-5}$ при $x = 0$ и

$$\delta = \frac{T_{h_x}(x, 1) - T_{h_x/2}(x, 1)}{T_{h_x/2}(x, 1) - T_{h_x/4}(x, 1)} \simeq 4.$$

При прямоугольном источнике (13), имеющем разрывы, точность ухудшается:

$$\max|T_{h_x}(x, 1) - T_{h_x/2}(x, 1)| = 5,21 \cdot 10^{-2}, \quad \max|T_{h_x/2}(x, 1) - T_{h_x/4}(x, 1)| = 2,6 \cdot 10^{-2}$$

при $x = 0,07$ и при этом $\delta \simeq 2$. Как видно, из-за того, что в точке $x = 0,07$ функция источника (13) имеет разрыв, порядок вычислительной схемы становится $O(h_x + h_t^2)$.

Так как при решении задачи (6)-(10) главной целью является нахождение линии фронта, по которой перемещается температура плавления $T(\xi, t) = T_{пл}$, то важно оценить точность нахождения линии $\xi = \xi(t)$. Для прямоугольного источника $\max|t_{h_x}(\xi) - t_{h_x/2}(\xi)| = 1,47 \cdot 10^{-1}$, $\max|T_{h_x/2}(x, 1) - T_{h_x/4}(x, 1)| = 2,47 \cdot 10^{-2}$ при $x = 0,313$; для гладкого источника $\max|t_{h_x}(\xi) - t_{h_x/2}(\xi)| = 1,54 \cdot 10^{-2}$, $\max|T_{h_x/2}(x, 1) - T_{h_x/4}(x, 1)| = 1,11 \cdot 10^{-2}$ при $x = 0,313$.

Чтобы убедиться в правильности решения задачи Стефана, используем следующий искусственный прием. Решая уравнение теплопроводности с заданными начальными и граничными условиями (с постоянными шагами h_x , h_t), находим температурное поле $T(x, t)$ в любой момент времени t . При этом будем

следить за фронтом заданной температуры $T^0 = \text{const}$, т.е. методом интерполяции будем находить кривую $\xi = \xi(t)$, по которой перемещается температура $T^0 = \text{const}$. На рис. 1 приведены линии фронтов нескольких температур ($T^0 = 4,5$; $T^0 = 6,14$; $T^0 = 7,5$).

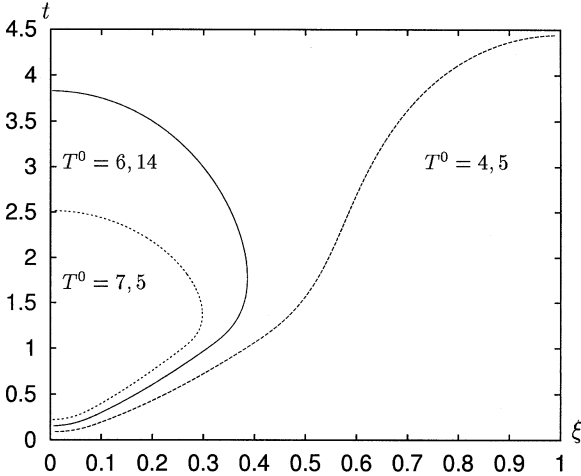


Рис. 1

Теперь этим же путем находим фронт температуры, равной температуре плавления $T = T_{\text{пл}}$. Найденная таким способом линия $\xi = \xi(t)$ эквивалентна нахождению линии постоянной температуры, равной температуре плавления при решении задачи Стефана без учета теплоты плавления, т.е. при $A = 0$. Следовательно, решая задачу Стефана при $A = 0$, найденную линию $\xi = \xi(t)$ будем сравнивать с кривой, полученной по методу интерполяции. На рис. 2 приведены графики $\xi^{\text{инт}}$ и ξ^{Stef} , полученные соответственно методом интерполяции и путем решения задачи Стефана в одной и той же системе координат. На рисунке эти две кривые практически совпадают. При этом $\max|t(\xi^{\text{инт}}) - t(\xi^{\text{Stef}})| = 2,46 \cdot 10^{-2}$ в точке $\xi = 0,386$, т.е. эти графики имеют самое большое отклонение вблизи точки поворота при $\xi = 0,386$.

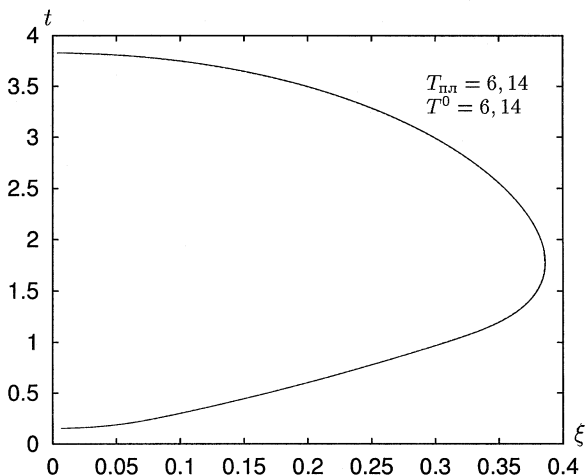


Рис. 2

5. Численный эксперимент и обсуждение его результатов

Поскольку, как мы уже отметили выше, для прямоугольного источника точность вычисления низкая, то численный эксперимент будем проводить только для гладкого источника.

Как и в работе [16], все физические параметры задачи выбираем для мишени из железа, а именно:

$\rho_2 = 7870 \text{ кг/м}^3$, $c_2 = 456 \text{ Дж/кгК}$, $\lambda_2 = 78,2 \text{ Вт/мК}$, $L = 2,7 \cdot 10^5 \text{ Дж/кг}$,
 $T_{пл} = 1799 \text{ К}$, $\rho_1 = 7566 \text{ кг/м}^3$, $c_1 = 700 \text{ Дж/кгК}$, $\lambda_1 = 78,2 \text{ Вт/мК}$ (параметры жидкого железа),

и для ионного пучка углерода, для которого

$$E_0 = 250 - 350 \text{ кэВ}; j_{\max} = 200 - 1000 \text{ А} \cdot \text{см}^{-2}; Z = 1.$$

Тогда постоянные A , k_0 , q_0 принимают следующие приближенные значения:

$$A = 30,91; k_0 = 6,54 \cdot 10^{-2}; q_0 = 59,44.$$

Приведем решения исходной задачи (4)-(10) для трех случаев, т.е. при

1. $A = 0$; $c_1 = c_2 = 456$ Дж/кгК (отсутствие плавления);

2. $A = 30,91$; $c_1 = c_2 = 456$ Дж/кгК (учет фазового перехода без изменения теплоемкости);

3. $A = 30,91$; $c_1 > c_2$, $c_2 = 456$ Дж/кгК, $c_1 = 700$ Дж/кгК (учет фазового перехода с учетом изменения теплоемкости).

На рис. 3 приведены графики временной зависимости температуры поверхности металла $T(0, t)$ для источника (14). На рис. 4 представлены графики перемещения межфазовой границы $\xi = \xi(t)$ (глубина проникновения температуры, равной температуре плавления, внутрь образца как функция времени). Учет изменения теплоемкости (случай 3) приводит к уменьшению максимальной глубины проплава металла.

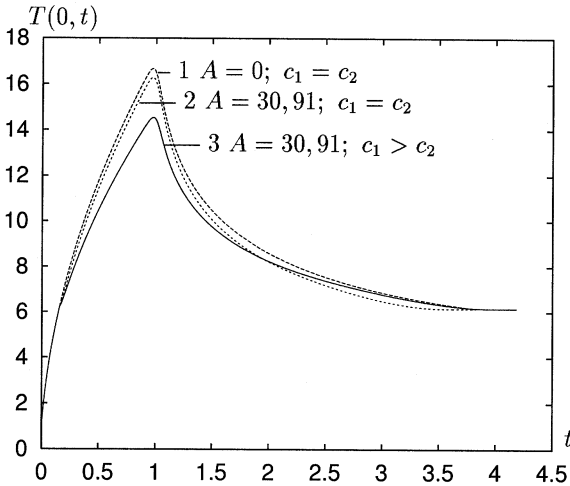


Рис. 3

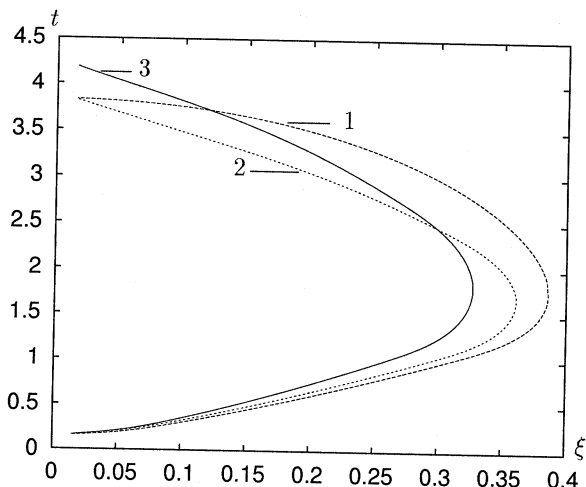


Рис. 4

На рис. 5 приведены временные зависимости функции $\frac{\partial T}{\partial x}$ (для случая 3) со стороны жидкости и твердого тела на границе $\xi = \xi(t)$. На этом рисунке выделены три времени (t_1, t_2, t_3):

t_1 – время, когда фронт плавления достигает точки ($x_1 \simeq 0,07$), где источник практически равен нулю,

t_2 – время выключения источника, когда источник практически равен нулю,

t_3 – время начала кристаллизации.

Интересно проследить, как влияет способ выключения источника на перемещение межфазовой границы, т.е. как зависит $\xi(t)$ от способа задания функции $q_2(t)$. Для этого временную зависимость источника выбираем в виде (14) с $\mu_1 = 100$ и $\mu_2 = 5$, а также

$$q_2(t) = \begin{cases} 1, & 0 < t < 1, \\ e^{-\mu(t-1)}, & 1 \leq t < \infty; \end{cases}$$

где $\mu = 5$.

Результаты численных расчетов приведены на рис. 6.

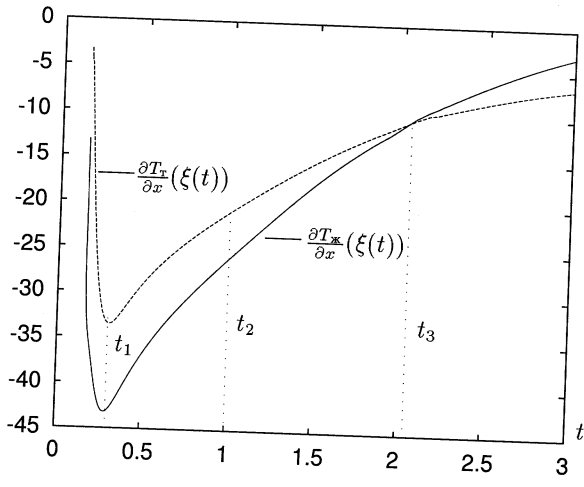


Рис. 5

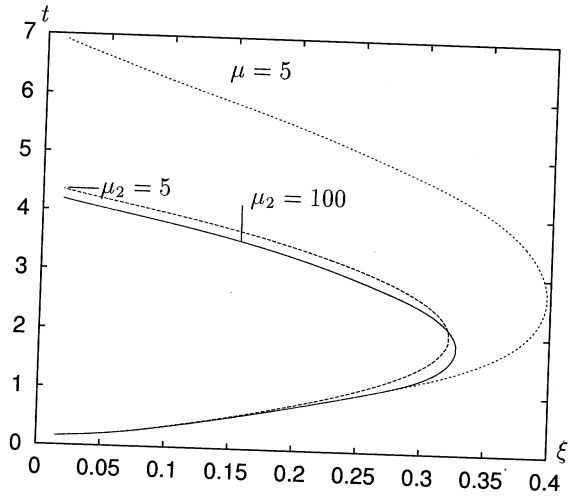


Рис. 6

Как видно, выбирая характеристики источника, можно управлять перемещением межфазовой границы $\xi = \xi(t)$.

6. Заключение

В работе представлен метод численного решения задачи Стефана для металлического образца, облучаемого сильноточным источником ионов углерода. Проведен численный анализ точности вычислительной схемы. Выполнено численное исследование зависимости межфазовой границы $\xi(t)$ от формы и интенсивности источника. Продемонстрированные результаты численных экспериментов находятся в согласии с выводами, вытекающими из физических соображений.

Следует подчеркнуть, что представленные результаты получены для простейшей модели, когда зависимость теплоемкости и теплопроводности от температуры, а также потери или приход тепла через границы не учитываются. В дальнейшем, чтобы выяснить, как влияет каждый из этих эффектов на поведение межфазовой границы $\xi = \xi(t)$, постепенно надо усложнять модель путем учета зависимостей $c(T)$, $\lambda(T)$ и $\partial T/\partial x|_{x=0} = f_1(t)$, $\partial T/\partial x|_{x=1} = f_2(t)$ (здесь функции $f_1(t)$, $f_2(t)$ учитывают приход или потерю потока тепла через границы $x = 0$ и $x = 1$).

Литература

1. В.И.Бойко, А.Н.Валеев, А.Д.Погребняк. УФН, 1999, т.169, N11, с.1243.
2. R.W.Stinnett et al. Thermal surface treatment using intense, pulsed ion beams. Proc. Materials Research Society Symp.: Materials Synthesis and Processing Using Ion Beams. Boston, 1994, V.316. p.521-532.
3. А.Н.Диденко, А.Е.Лигачев, И.Б.Куракин. Воздействие пучков заряженных частиц на поверхность металлов и сплавов. М.: Энергоатомиздат, 1987.
4. С.А.Коренев. Импульсная взрывная ионная вакуумная конденсация. Препринт ОИЯИ Р13-89-615, Дубна, 1989.
5. С.И.Анисимов, Я.А.Имас, Г.С. Романов, Ю.В.Ходыко. Действие излучения большой мощности на металлы. М.: Наука, 1970.
6. Ю.А.Быковский, В.Н.Неволин, В.Ю.Фоминский. Ионная и лазерная имплантация металлических материалов. М.: Энергоатомиздат, 1991.
7. В.И. Бойко, В.В. Евстигнеев. Введение в физику взаимодействия сильноточных пучков заряженных частиц с веществом. М.: Энергоатомиздат, 1988, с.137.
8. В.И. Мажуркин, А.А. Самохин. Математическое моделирование. Под ред. А.А. Самарского, С.П. Курдюмова, В.И. Мажуркина. М.: Наука, 1987, с.191-244.
9. Г. Карлсру, Д. Егер. Теплопроводность твердых тел. М.: Наука, 1964.
10. Н.М. Беляев, А.А. Рядно. Методы теории теплопроводности. М.: Высшая школа, 1982, т.1,2.
11. А.А. Самарский, Б.Д. Моисеенко. Экономичная схема сквозного счета для

- многомерной задачи Стефана. ЖВМ и МФ, 1965, т.5, N5, с.816-827.
12. Б.М. Будак, Ф.П. Васильев, А.Б. Успенский. Разностный метод со сглаживанием коэффициентов для решения задач Стефана. ЖВМ и МФ, 1965, т.5, N5, с.828-840.
13. Э.А. Айрян, С.И. Баструков, М.С. Касчиев, С.А. Коренев, Д.В. Подгайный, И.В. Пузынин, А.В. Федоров, А.М. Червяков. Профиль температурного фронта и глубина проплава поверхности металла, облученной сильноточным ионным пучком. Изв. вузов, т.12, 1998, с.13.
14. Э.А. Айрян, И.В. Амирханов, Б.Ф. Костенко, Я. Прибиш, И. Сархадов. Сообщение ОИЯИ Р11-2000-271, Дубна, 2000.
15. И.В.Амирханов, И.В.Пузынин, В.Н.Самойлов, В.К.Федянин, Х.Т.Холмуродов. Сообщение ОИЯИ Р2-98-63, Дубна, 1998; Сообщение ОИЯИ Р2-98-201, Дубна, 1998.
16. И.В. Амирханов, Е.В. Земляная, И.В. Пузынин, Т.П. Пузынина, И. Сархадов. Сообщение ОИЯИ Р11-2000-263, Дубна, 2000.
17. А.А. Самарский. Теория разностных схем. М.: Наука, 1983, с.258-276.

Рукопись поступила в издательский отдел
3 августа 2001 года.

Амирханов И.В. и др.

P11-2001-164

Численное моделирование фазовых переходов в металлах,
облучаемых импульсными пучками ионов

В работе представлен метод численного анализа задачи Стефана для образца металла, находящегося под воздействием сильноточного импульсного пучка ионов. В предположении термоизоляции боковых поверхностей образца исследована динамика перемещения межфазовой границы $\xi = \xi(t)$, разделяющей расплавленную и твердую части образца. В зависимости от интенсивности пучка и продолжительности действия источника образец может полностью расплавиться либо после плавления начнется обратный процесс — кристаллизация. Установлено, что форма источника влияет на форму межфазовой границы $\xi = \xi(t)$. Таким образом, путем выбора характеристик источника можно управлять эволюцией межфазовой границы $\xi(t)$.

Работа выполнена в Лаборатории информационных технологий ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна, 2001

Перевод Аристарховой М.В.

Amirkhanov I.V. et al.

P11-2001-164

Numerical Simulation of Phase Move
in Metals Irradiated by Pulse Ion Beams

A method of numerical analysis of Stefan's problem for a metal sample exposed to a high-current pulse ion beam is presented. In supposition that the lateral areas of the sample are thermo-isolated, we investigate the dynamics of moving the interphase $\xi = \xi(t)$ separating the melted and firm part of the sample. Depending on the beam intensity and duration of acting the source, the sample can melt completely, otherwise upon melting an inverse process of crystallization starts. It has been found that the form of the source influences the form of the interphase $\xi = \xi(t)$. Therefore, choosing the characteristics of the source, one can control the evolution of the interphase $\xi(t)$.

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

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna, 2001

Редактор Е.Ю.Шаталова. Макет Н.А.Киселевой

Подписано в печать 05.09.2001

Формат 60 × 90/16. Офсетная печать. Уч.-изд. л. 1,24

Тираж 315. Заказ 52846. Цена 1 р. 24 к.

Издательский отдел Объединенного института ядерных исследований
Дубна Московской области