

06;12

Распределение температуры в образце с микроскопическим включением второй фазы при облучении низкоэнергетическим импульсным сильноточным электронным пучком

© Д.А. Шепель, А.Б. Марков[†]

Институт сильноточной электроники СО РАН, Томск

[†] E-mail: almar@lve.hcei.tsc.ru

Поступило в Редакцию 19 апреля 2016 г.

С помощью методов численного моделирования рассчитано температурное поле, возникающее в поверхностном слое мишени из никелида титана, содержащей включения интерметаллида NiTi_2 , облучаемой низкоэнергетическим сильноточным электронным пучком микросекундной длительности. Полученное температурное поле сравнивалось с температурным полем, рассчитанным ранее для мишени из нержавеющей стали 316L, содержащей включения из сульфида марганца (MnS). Обнаружено, что, как и в случае с нержавеющей сталью, в области расположения включения существует перегрев. Однако величина перегрева в случае никелида титана (12 К) существенно ниже, чем в случае нержавеющей стали 316L (283 К). Также существенно отличается динамика плавления двух систем.

DOI: 10.21883/PJTF.2017.03.44221.16301

Нержавеющая сталь 316L и никелид титана (NiTi) — металлические сплавы, которые, благодаря своим физическим и химическим свойствам, до сих пор широко применяются для изготовления имплантатов [1].

Одной из наиболее важных характеристик материалов с точки зрения применения в медицине является коррозионная стойкость, которая может быть существенно повышена путем облучения низкоэнергетическим сильноточным электронным пучком (НСЭП). Однако известно, что в результате обработки поверхности НСЭП на облучаемой поверхности возможно образование микрократеров. Появление микрократеров ухудшает свойства поверхности. Причиной их появления является присутствие в материале включений второй фазы. В частности, показано, что на облучаемой поверхности образца из нержавеющей стали местами возникновения микрократеров являются места расположения частиц сульфида марганца (MnS). Для образцов из никелида титана характерно появление микрократеров на местах расположения частиц интерметаллида NiTi₂ [2]. Поскольку материал включений второй фазы имеет теплофизические свойства, отличные от свойств материала матрицы, то его присутствие будет оказывать влияние на распределение температуры в области расположения включения. Знание распределения температуры необходимо для понимания механизма образования кратеров.

Цель данной работы заключалась в расчете и анализе температурных полей, индуцированных в образцах из нержавеющей стали 316L и NiTi. Полагалось, что материалы являются гомогенными, но содержат микроскопические включения вторых фаз.

Двумерная расчетная область представляла собой квадрат со стороной $b = 30 \mu\text{m}$, в центре одной из сторон которого располагалось включение размером $1 \times 1 \mu\text{m}$ с отличными от матрицы теплофизическими свойствами. Эта сторона квадрата нагревалась однородным электронным пучком. Координатные оси были выбраны таким образом, чтобы облучаемая поверхность располагалась на координатной оси X , а направление падения пучка совпадало с положительным направлением координатной оси Y .

Моделирование температурного поля проводилось путем решения двумерного нелинейного нестационарного уравнения теплопроводности, учитывающего процессы плавления и кристаллизации и имеющего следующий вид:

$$\rho \left(c(T) + \delta(T(x, y, t) - T_m) L_m \right) \frac{\partial T(x, y, t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(k(T) \frac{\partial T(x, y, t)}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(k(T) \frac{\partial T(x, y, t)}{\partial y} \right) + W(x, y, t),$$

с граничными условиями, отражающими теплоизолированность пластины:

$$-k(T) \frac{\partial T(x, y, t)}{\partial x} \Big|_{x=0; b} = 0, \quad -k(T) \frac{\partial T(x, y, t)}{\partial y} \Big|_{y=0; b} = 0,$$

и начальным условием $T(x, y, 0) = T_0$. Здесь ρ — плотность материала; $c(T)$ — удельная теплоемкость; δ — дельта-функция Дирака; $T(x, y, t)$ — температурное поле; T_m — температура плавления; L_m — скрытая теплота плавления; $k(T)$ — теплопроводность; t — время; x и y — пространственные координаты; $W(x, y, t)$ — функция тепловых источников, характеризующая плотность мощности источников тепла и вычисляемая с помощью известных полуэмпирических формул [3]. Заметим, однако, что область применимости алгоритма ограничивается случаем расположения соседних включений на расстоянии $s > b$, когда температурные процессы, протекающие в области разных включений, слабо влияют друг на друга. Что касается физической адекватности описываемого алгоритма, она подтверждается тем, что на основе рассчитанных ранее данных [4] авторам [5] удалось получить оценку скорости радиального распространения расплава, которая хорошо совпала с экспериментальными результатами и дала возможность обосновать механизм формирования рельефа поверхности после облучения электронным пучком.

Расчеты выполнялись для двух типов образцов: первый — матрица из никелида титана, содержащая в центре облучаемой поверхности включение из NiTi_2 ($\text{NiTi}/\text{NiTi}_2$); второй — матрица из нержавеющей стали 316L с включением из сульфида марганца (SS 316L/MnS). Теплофизические свойства материалов матрицы и включения, используемые при расчетах, приведены в таблице. Они полагались одинаковыми для твердой и жидкой фазы.

Параметры пучка в данных расчетах подбирались таким образом, чтобы для обеих систем на облучаемой поверхности реализовывался режим начального плавления, характеризующийся толщиной расплава на периферии облучаемой поверхности $\sim 1 \mu\text{m}$. Для $\text{NiTi}/\text{NiTi}_2$ режим начального плавления реализовывался при плотности вкладываемой энергии $2 \text{J}/\text{cm}^2$, а для SS 316L/MnS — при $3 \text{J}/\text{cm}^2$. При этом длительность импульса составляла $4 \mu\text{s}$, а энергия электронов — 30keV . Предполагается, что параметры пучка в процессе облучения остаются постоянными.

Теплофизические свойства материалов

Материал	ρ , kg/m ³	k , W/(m · K)	c , J/(kg · K)	T_m , K	L_m , kJ/kg
NiTi	$6.45 \cdot 10^3$	18	438.6	1583	318.8
NiTi ₂	$6 \cdot 10^3$	15	485.4	1288	406.74
SS 316L	$8 \cdot 10^3$	16.3	500	1693	247
MnS	$4 \cdot 10^3$	2	582.8	1803	287

Путем численного моделирования были получены распределения температуры вдоль облучаемой поверхности и по глубине для двух видов образцов под воздействием НСЭП. На основе вычисления распределения температуры вдоль облучаемой поверхности были получены зависимости величины перегрева, под которым понималась разность между температурами в данной точке поверхности и на периферии образца, от координаты поверхности. Зависимости перегрева (ΔT) от координаты вдоль облучаемой поверхности для двух видов образцов представлены на рис. 1. Из характера зависимостей видно, что максимальное значение перегрева достигается в центре облучаемой поверхности, т.е. в области расположения включения. Кроме того, для двух систем значения перегрева существенно различаются. При облучении образца из никелида титана (кривая 1) перегрев, возникающий в центре мишени, составляет 12 К, а для образца из нержавеющей стали 316L (кривая 2) он составляет 283 К, т.е. почти в 25 раз больше. Из таблицы теплофизических свойств материалов видно, что теплоемкость, коэффициент теплопроводности и плотность NiTi и NiTi₂ различаются незначительно. В то время как коэффициент теплопроводности нержавеющей стали 316L почти на порядок выше коэффициента теплопроводности сульфида марганца, что и вызывает заметный перегрев поверхности в области расположения включения.

Неоднородность распределения температуры как вдоль поверхности, так и по глубине означает наличие градиентов температуры. В случае NiTi градиент температуры вдоль облучаемой поверхности к концу импульса составлял $2.2 \cdot 10^6$ К/м, а по глубине образца — $1.4 \cdot 10^8$ К/м. При облучении образца из нержавеющей стали 316L градиент температуры вдоль облучаемой поверхности составлял $5.1 \cdot 10^7$ К/м, а по глубине образца — $2.4 \cdot 10^8$ К/м. Видно, что для NiTi/NiTi₂ градиенты различаются между собой более чем в 60 раз, а для SS 316L/MnS всего

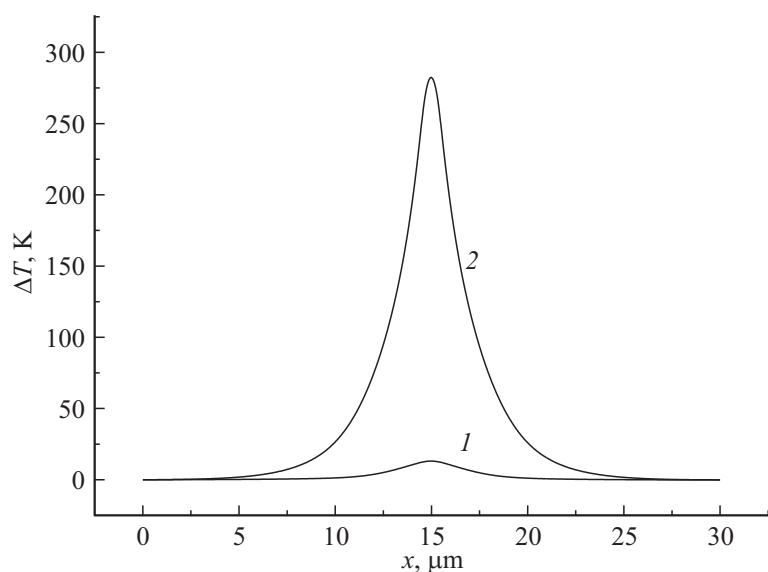


Рис. 1. Зависимость величины перегрева в центральной области поверхности, содержащей включение, относительно ее периферии: 1 — NiTi/NiTi₂, 2 — SS 316L/MnS.

в 5 раз. Кроме того, видно, что градиент температуры вдоль облучаемой поверхности для SS 316L/MnS превышает более чем в 20 раз значение градиента для образца NiTi/NiTi₂. Наличие градиентов температуры приводит к термокапиллярной конвекции, что, в свою очередь, является наиболее вероятной причиной возникновения кратеров на поверхности материалов [4–7].

Из литературы известно, что в результате облучения на поверхности образца из нержавеющей стали 316L доля образующихся кратеров составляет 0.25, это означает, что четыре включения дают один кратер [2]. На поверхности образца из никелида титана доля образующихся кратеров составляет приблизительно 0.07, т.е. почти в 4 раза меньше, чем для стали. Следовательно, существует корреляция между величиной температурного градиента и вероятностью образования кратера на включении. Чем больше градиент вдоль поверхности, тем выше вероятность образования кратеров.

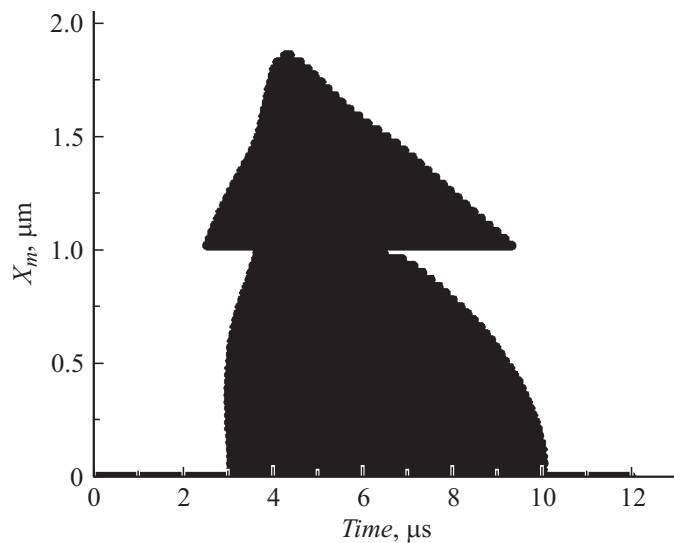


Рис. 2. Зависимость толщины расплава системы SS 316L/MnS в центре облучаемой поверхности в разные моменты времени.

Наличие на облучаемой поверхности включения, обладающего теплофизическими свойствами, отличными от теплофизических свойств материала матрицы, оказывает существенное влияние не только на величину возникающего перегрева, но и на процесс плавления. Плавление поверхности образца из нержавеющей стали 316L с включением из MnS уже обсуждалось в [4]. Однако при более детальном рассмотрении оказывается, что процесс плавления начинается в материале матрицы за включением, что видно из рис. 2. На представленном графике закрашенная область соответствует толщине расплава в центре облучаемой поверхности в разные моменты времени. Видно, что первая порция расплава появляется на глубине около $1 \mu\text{m}$. Затем, примерно через $1 \mu\text{s}$, расплав появляется на облучаемой поверхности. Эти области расплавов разделены нерасплавленным материалом включения. К концу импульса расплав становится сплошным, а его толщина достигает почти $2 \mu\text{m}$, затем начинается процесс кристаллизации материалов. Такое несплошное плавление материалов объясняется тем, что максимум

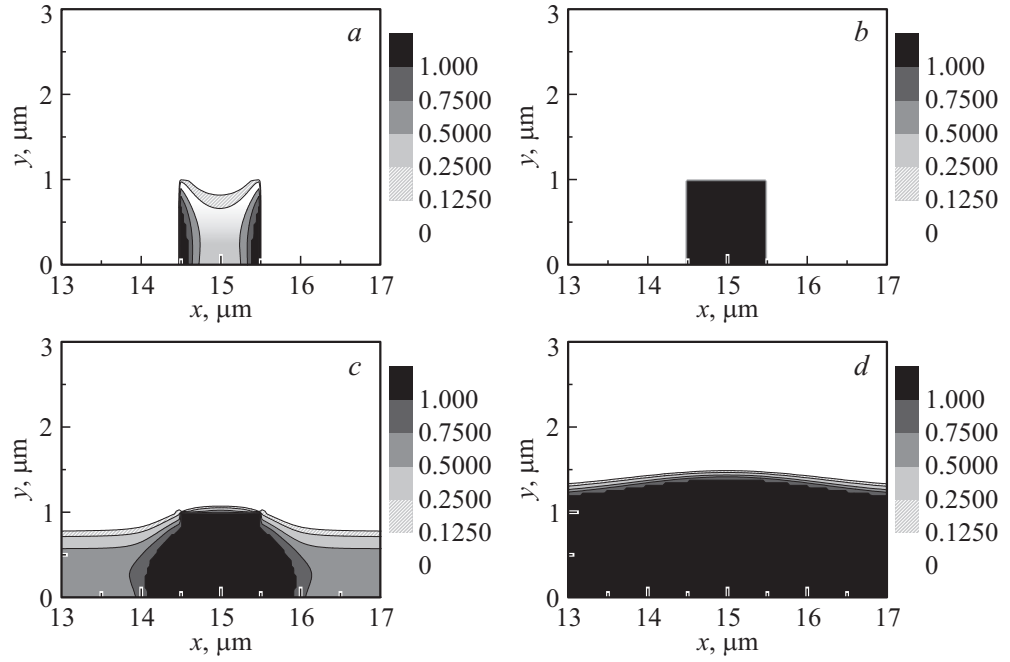


Рис. 3. Фазовые диаграммы для системы NiTi/NiTi₂ в моменты времени 2.0 (a), 2.3 (b), 3.3 (c) и 4.0 (d) μs соответственно. Области твердой фазы, двухфазной зоны и расплава выделены белым, оттенками серого и черным цветом соответственно. НСЭП падает в положительном направлении оси y (снизу рисунка).

энерговыведения располагается близко к тыльной стороне включения, а температура и скрытая теплота плавления сульфида марганца выше, чем для нержавеющей стали 316L.

На рис. 3 представлены фазовые диаграммы, демонстрирующие динамику процесса плавления NiTi/NiTi₂ под воздействием НСЭП. Цветовая шкала, приведенная сбоку от диаграммы, показывает долю вложенной скрытой теплоты плавления: белым цветом закрашены области, где процесс плавления еще не начался, а черным — области, где материал полностью расплавлен. Плавление образца из никелида титана начинается на границах включения примерно через 2 μs после начала облучения. Область расплава от границ включения распространяется к его центру (рис. 3, *a*). К моменту 2.3 μs включение уже полностью расплавлено (рис. 3, *b*), а плавление материала матрицы (NiTi) начинается после 3 μs (рис. 3, *c*). Затем область расплава быстро распространяется к периферии образца. К 3.6 μs расплав толщиной около 0.6 μm покрывает всю поверхность. Далее толщина расплавленного слоя на поверхности образца постепенно увеличивается и к моменту окончания импульса достигает 1.2 μm на периферии и 1.4 μm в центре облучаемой поверхности (рис. 3, *d*). До момента времени 4.8 μs вся облучаемая поверхность покрыта расплавом. Примерно к 5.5 μs материал матрицы полностью кристаллизуется, в то время как включение остается расплавленным. Кристаллизация включения начинается после 7.8 μs и продолжается до момента 9.8 μs.

Из полученных результатов видно, что наличие включения на облучаемой поверхности приводит к неоднородности распределения температуры вдоль этой поверхности. Степень неоднородности распределения, характеризуемая перегревом, для разных систем может существенно отличаться: это объясняется соотношением теплофизических свойств материалов матрицы и включения. Существует корреляция между величиной градиента температуры и вероятностью образования кратера на включении. Чем больше градиент температуры вдоль поверхности, тем выше вероятность образования кратеров. Процесс плавления систем SS 316L/MnS и NiTi/NiTi₂ существенно отличается: плавление системы SS 316L/MnS начинается в приповерхностном слое, а не на облучаемой поверхности.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 16-08-00920 а.

Список литературы

- [1] *Hermawan H., Ramdan D., Djuansjah J.R.P.* // Biomedical Engineering: from Theory to Applications / R. Fazel (ed.). InTech Pub, Croatia, 2011. P. 411–430.
- [2] *Zou J., Zhang K., Dong C.* et al. // *Appl. Phys. Lett.* 2006. V. 86. P. 041913.
- [3] *Markov A.B., Rotshtein V.P.* // *Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B.* 1997. V. 132. P. 79–86.
- [4] *Шепель Д.А., Марков А.Б.* // Письма в ЖТФ. 2011. Т. 37. В. 16. С. 63–70.
- [5] *Озур Г.Е., Проскуровский Д.И., Ротштейн В.П.* // Письма в ЖТФ. 2016. Т. 42. В. 6. С. 97–103.
- [6] *Марков А.Б., Мейснер Л.Л., Яковлев Е.В.* и др. // Известия вузов. Физика. 2015. Т. 58. № 9/3. С. 173–177.
- [7] *Meisner L.L., Markov A.B., Proskurovsky D.I.* et al. // *Surf. Coat. Tech.* 2016. V. 302. P. 495–506.