

**С.П. Баканов, Б.Н. Пойзнер**

### **СИСТЕМА «СО<sub>2</sub>-ЛАЗЕР+ИСТОЧНИК ИОНОВ» КАК СТИМУЛЯТОР НЕАДДИТИВНЫХ ПРОЦЕССОВ НА ПОВЕРХНОСТИ МЕТАЛЛОВ**

Обсуждается гипотеза о неаддитивности со-воздействия и о новых синергетических особенностях эволюции системы «твердое тело – плазменное облако – потоки энергии (вещества)»; схема априорного комбинирования воздействий. Рассматриваются структура программного пакета для исследования эволюции состояния вещества мишени широкого класса материалов при со-воздействии на них различных типов концентрированных потоков энергии (КПЭ), а также перспективы компьютерного генерирования физических и математических моделей исходя из выбираемых условий. Представлены модель термоокисления металлов с легко возгоняющимся окислом пучком ионов кислорода в присутствии лазерного излучения и модель лазерно-электродугового плавления металлов, а также предварительные результаты моделирования.

Представляется целесообразным рассмотреть роль импульсных газовых лазеров в контексте разработки новых технологий, концептуально опирающихся на идеи нелинейной физики и использующих воздействие на вещество концентрированных потоков энергии (КПЭ) самой различной природы. Среди других перспективных способов воздействия на мишень можно указать пучки заряженных частиц (ионы, электроны и т.д.), различные неоднородные во времени и пространстве поля и т.д. Разноприродность КПЭ, естественно, относительна; о ней можно говорить лишь при макроописании процессов.

В теоретическом плане представляет интерес синергетичность процессов, происходящих в веществе под воздействием КПЭ. В качестве примера можно привести работы [2–3]. Приходится констатировать отсутствие теоретических исследований одновременного воздействия (со-воздействия) нескольких КПЭ разной природы.

Со-воздействие наблюдается в случае, если КПЭ:

- влияют на комплекс общих параметров среды;
- порождают, поддерживают и контролируют одни и те же либо взаимосвязанные процессы (телоперенос, фазовые переходы, диффузия, макрокинетические явления и т.д.);
- сосуществуют во времени и имеют объектом воздействия общее либо сопредельное пространство.

Представляется обоснованной гипотеза о неаддитивности со-воздействия, т.е. о появлении новых синергетических особенностей эволюции исследуемых систем при со-воздействии на них двух и более разноприродных КПЭ.

Ограничимся рассмотрением только твердого тела (ТТ) и прилегающего к нему пространства в качестве объекта воздействия. При этом можно ожидать такого взаимодействия подсистем в данной системе, как на рис. 1, а.

Предлагается универсальный инструмент для теоретического исследования эволюции состояния вещества мишени широкого класса материалов при со-воздействии на них всевозможных типов КПЭ – от механического давления до рентгеновского облучения. Он заключается в поэтапном компьютерном генерировании физических и математических моделей (в границах выбираемых исследователем условий: объекта со-воздействия, характеристик со-воздействующих факторов, состояния окружающей мишень среды, приближений модели и т.д.), всестороннее их исследование, уточнение и сравнение – в рамках единого программного пакета. Структура пакета представлена на рис. 1, б. При этом целью может быть создание физических основ такого типа технологии, которая с помощью мультипликативного эффекта всей совокупности воздействий и управления неравновесностью процессов в коллективе взаи-

мосвязанных подсистем способна реализовать принципиально новые механизмы самоорганизации внутренней структуры материалов.

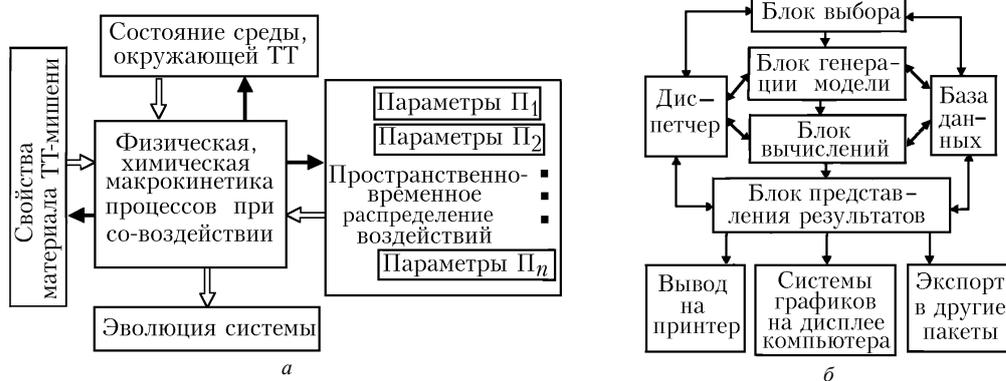


Рис. 1. Структурное представление факторов, определяющих эволюцию системы.  $P_1, P_2, \dots, P_n$  – концентрированные потоки энергии различной природы (а) и строение пакета программ для моделирования со-воздействий на различные ТТ (б)

В настоящее время воплощены фрагменты данного пакета: некоторые вычислительные модули – интегрирование систем дифференциальных уравнений (модифицированный метод Рунге–Кутты–Мерсона), проверка решений на устойчивость (метод Рауса–Гурвица) – элементы интерфейса и баз данных. Это позволяет исследовать эволюцию системы в некоторых конкретных случаях [4–6]. В качестве иллюстрации кратко рассмотрим 2 модели: 1) точечную модель термоокисления металла с легко возгоняющимся окислом (типа вольфрама W) пучком ионов в присутствии лазерного излучения (импульсный  $\text{CO}_2$ -лазер) [4]; 2) модель процессов при со-воздействии на металл электрической дуги и лазерного излучения [5].

1. Временная эволюция системы «твердое тело (металл + слой окисла на поверхности) – плазменное облако (в основном ионы  $\text{WO}_3$ ) – лазерное излучение – пучок ионов кислорода» – может быть описана динамикой четырех переменных:  $X, Y$  – количество вещества окисла на поверхности металла и в облаке соответственно,  $T$  и  $\mathcal{M}$  – средние температуры ТТ и облака соответственно.

Модель представлена самосогласованной системой обыкновенных нелинейных дифференциальных уравнений:

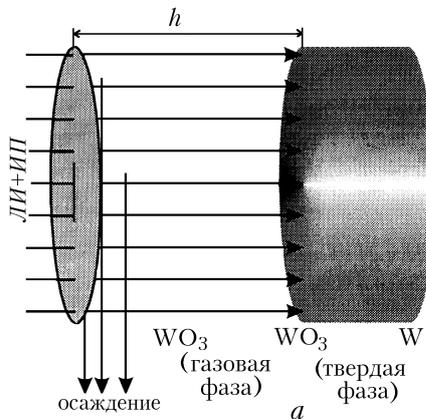
$$\begin{aligned} \frac{dX}{dt} &= \frac{\alpha_1}{X} e^{-\alpha_2/T} + \alpha_3 - \alpha_4 e^{-\alpha_5/T} - \frac{\alpha_6}{X} [1 - \exp(\alpha_7 Y - \alpha_8)]; \\ \frac{dY}{dt} &= \alpha_9 e^{-\alpha_5/T} + \frac{\alpha_{10}}{X} [1 - \exp(\alpha_7 Y - \alpha_8)] - \alpha_{11} \frac{Y}{\mathcal{M}} - \alpha_{12}; \\ \frac{dT}{dt} &= \alpha_{13} X^2 \exp\left[\frac{-\alpha_{30} Y^2}{(1-Y)^{1/2} \mathcal{M}^{\beta/2}}\right] + \alpha_{14} \exp\left[\frac{-\alpha_{30} Y^2}{(1-Y)^{1/2} \mathcal{M}^{\beta/2}}\right] + \alpha_{15} - \alpha_{16} Y + \frac{\alpha_{17}}{X} e^{-\alpha_2/T} - \alpha_{18} e^{-\alpha_5/T} - \\ & - (\alpha_{19} T - \alpha_{20} \mathcal{M}) - (\alpha_{21} T^4 - \alpha_{22} \mathcal{M}^4); \\ \frac{d\mathcal{M}}{dt} &= \alpha_{23} - \alpha_{23} \exp\left[\frac{-\alpha_{30} Y^2}{(1-Y)^{1/2} \mathcal{M}^{\beta/2}}\right] + \alpha_{24} Y + (\alpha_{25} T - \alpha_{19} \mathcal{M}) + (\alpha_{26} T^4 - \alpha_{27} \mathcal{M}^4) - \alpha_{28} \mathcal{M} + \alpha_{28} \alpha_{29}, \end{aligned} \quad (1)$$

где  $\alpha_1 - \alpha_{30}$  – безразмерные коэффициенты, не зависящие (в данной модели) от  $X, Y, T, \mathcal{M}$ . Первое и третье уравнения системы (1) описывают тепловой баланс для вещества в ТТ и в облаке соответственно; второе и четвертое отражают обмен веществом между ТТ, облаком и окружающей средой.

На рис. 2, а показаны факторы и приповерхностные процессы, учитываемые при выводе (1). Порядок следования слагаемых в правых частях обеих систем одинаковый.

При выводе уравнений этих процессов (на основе модели из [2]) были сделаны следующие основные приближения (рис. 2, б):

- мишень однородная, с плоской поверхностью, термически тонкая, в вакууме;
- задняя и боковые стенки ТТ теплоизолированы;
- потоки равномерно покрывают поверхность, падая перпендикулярно ей;



$$\begin{aligned}
 \frac{dX}{dt} &= \boxed{\text{окисление на поверхности твердого тела (по Вагнеру)}} + \boxed{\text{неравно-весная добавка}} - \boxed{\text{возгонка с поверхности}} - \boxed{\text{травление поверхности}} + \dots; \\
 \frac{dY}{dt} &= \boxed{\text{возгонка с поверхности}} + \boxed{\text{травление поверхности}} - \boxed{\text{конден-сация}} - \boxed{\text{принуди-тельное удаление}} + \dots; \\
 \frac{dT}{dt} &= \boxed{\text{падающая на твердое тело энергия лазерного пучка}} + \boxed{\text{падающая на твердое тело энергия ионного пучка}} + \boxed{\text{энергия, выделенная при окислении}} - \boxed{\text{энергия, поглощен-ная при возгонке}} + \boxed{\text{теплообмен облака с твердым телом}} + \dots; \\
 \frac{d\mathcal{M}}{dt} &= \boxed{\text{энергия лазер-ного пучка, удержанная облаком}} + \boxed{\text{энергия ион-ного пучка, удержанная облаком}} \pm \boxed{\text{теплообмен облака с твердым телом}} - \boxed{\text{энергия, переданная «холодильнику»}} + \dots
 \end{aligned}$$

Рис. 2. Физическая модель лазерно-пучкового термоокисления металла типа W (см. систему уравнений (1)–а; простейшая модель со-воздействия (см. текст, [4]) – б

– лазерный и ионный пучки действуют в непрерывном режиме, стационарные, не модулированные,  $E_{\text{пучка ионов}} \in [0,5;5]$  кэВ, заряд ионного пучка скомпенсирован ионным фоном, лазерное излучение – в ИК-области;

–  $T \in [20; 3420]^\circ\text{C}$ ;

– в системе идет лишь реакция типа  $2W + 3O_2 \rightarrow 2WO_3$ , пленка окисла из  $WO_3$ , тонкая, однородная, плоская и параллельная поверхности мишени;

–  $Y$  – среднее количество вещества в облаке,  $\mathcal{M}$  – средняя температура облака,  $V_{\text{облака}} = \text{const}$ ,

$$\sum_i q_i = 0;$$

– в ТТ рассматриваются только поверхностные процессы;

– конденсированное в объеме облака вещество не возвращается на поверхность, конденсацией на поверхности ТТ пренебрегаем;

– процесс возгонки не зависит от падающего потока;

– модель – точечная;

– потоки не взаимодействуют друг с другом и не рассеиваются.

Проведена серия вычислительных экспериментов, результаты которых позволяют сделать следующие выводы:

– характер нестационарных процессов зависит от интенсивности каждого из пучков; процесс приобретает явно колебательный вид с превышением некоторых пороговых значений

интенсивностей пучков – наблюдается бифуркация Хопфа (рис. 3, а, в), что согласуется с экспериментальными данными других авторов [7];

– зависимость эволюции системы от начальных значений переменных не обнаружена (рис. 3, а, б), что не противоречит [3];

– характер процессов зависит определенным образом от интенсивности теплообмена подсистем: твердого тела и облака, облака и холодильника, что вполне объяснимо из физических соображений; например, выход системы на «странный аттрактор» может обеспечиваться соответствующей комбинацией тепловых характеристик системы;

– модель и соответствующий ей программный модуль работоспособны в относительно широких интервалах значений параметров данной и других подобных задач.

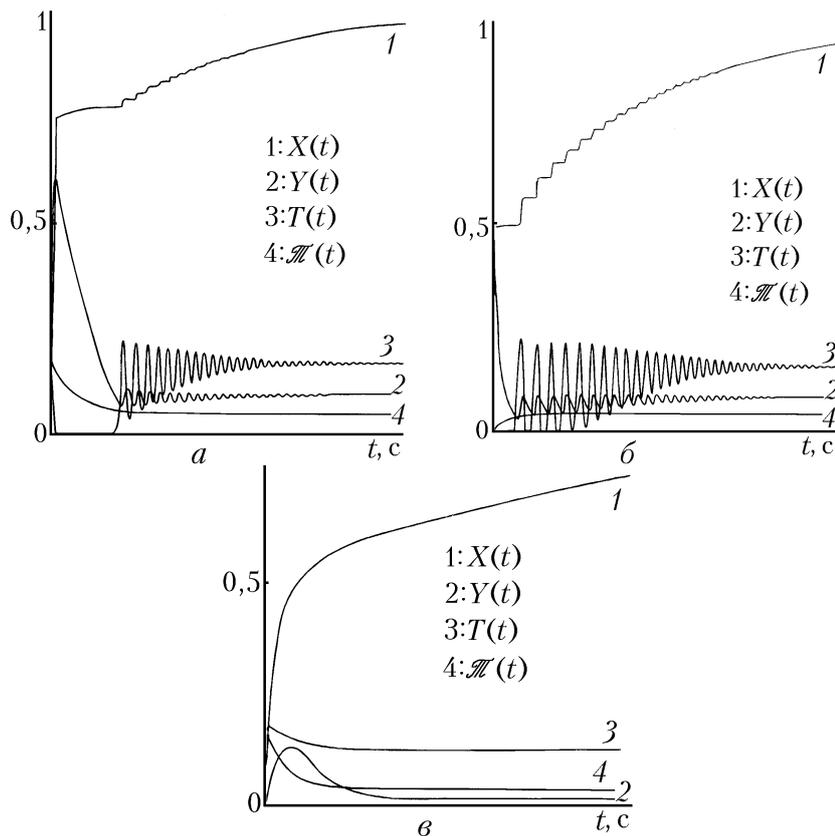


Рис. 3. Результаты компьютерного моделирования лазерно-пучкового термоокисления металла типа W ([4], система уравнений (1)): а – «тестовая» задача (с параметрами, частично отражающими условия экспериментов авторов [2]); б – пример временной эволюции системы с измененными начальными условиями – стационарные  $X, Y, T, Z$  те же, что и в «тесте» (а); в – пример набора «допороговых» интенсивностей пучков:  $I_{ли} = 21000, I_{ни} = 50000$ . Автоколебательный режим не устанавливается

2. Далее рассмотрим процессы изменения плотности и температуры плазмы при воздействии лазерного излучения и электрической дуги на ванну расплава мишени.

Исходными являются точечные модели динамики молекул и температуры эрозивного факела при резонансном поглощении излучения лазера, воздействующего на металл [6, 7]. Обсуждаемая модель отличается следующим:

- учитывается возрастание плотности плазмы за счет фотоионизационных процессов, обусловленных интенсивностью лазерного излучения и высокими значениями энергий электронов;
- динамика концентрации пара описана более точно по сравнению с [6, 7];
- учтены теплопотери за счет излучательной способности плазмы, а также уменьшения температуры за счет взаимодействия электронного и ионного компонентов плазмы;
- «насыщающая» концентрация пара приведена к начальным условиям;
- учтена протяженность плазменного факела вдоль лазерного пучка, соотношенная с расстоянием между катодом и анодом электродуговой лампы;

- описана экранировка лазерного излучения плазмой.

К сделанным приближениям относятся:

- точечный характер;
- представление модели вне рамок задачи Стефана в связи с отсутствием временной зависимости фазовых границ;
- ограничение двумя степенями свободы плазмы, сужающее возможность объяснить некоторые коллективные явления;
- игнорирование некоторых особенностей механизмов поглощения энергии плазмы в металле.

Результаты вычислительного эксперимента на основе данной модели для частных случаев согласуются с выводами [3, 6, 7]. В частности, наблюдавшаяся в ходе моделирования возможность согласования фаз колебаний концентрации плазмы в облаке с периодическим изменением интенсивности лазерного излучения имеет подтверждение в способе улучшения характеристик прокаливания [8].

Обе рассмотренные модели претендуют лишь на качественное описание эволюции соответствующих систем. Это связано в основном с неопределенностью многих физических констант в уравнениях, а также с отсутствием на данный момент возможности проведения натуральных экспериментов. Тем не менее полученные результаты не опровергают исходную гипотезу о неаддитивности со-воздействия и могут служить некоторым фундаментом для построения метамоделей сложного проявления открытости неравновесных систем.

Дальнейшие шаги на этом пути, по мнению авторов, должны заключаться:

- в проведении серии натуральных экспериментов с целью последовательного уточнения вышеупомянутых моделей и использовании их в дальнейшем в качестве средства верификации системы компьютерного генерирования моделей неравновесных процессов при разноприродных со-воздействиях;
- в определении путем новых вычислительных экспериментов условий динамического хаоса, бифуркаций;
- в сравнении временных эволюций системы при воздействии на нее двух потоков разной природы и при одноприродном воздействии (например, окисление  $W$  в атмосфере кислорода при лазерном облучении [3]);
- в осуществлении перехода к распределенным моделям.

В заключение авторы выражают глубокую признательность Е.В. Картаеву за полезные дискуссии и предоставленные результаты.

1. Месяц Г.А., Осипов В.В., Тарасенко В.Ф. Импульсные газовые лазеры. М.: Наука, 1991. 200 с.
2. Бункин Ф.В. и др. // Изв. АН СССР. Сер. Физ. 1981. Т. 45. N 6. С. 1018–1042.
3. Нестационарные структуры и диффузионный хаос / Т.С. Ахромеева и др. М.: Наука, 1992. 544 с.
4. Баканов С.П., Сафьянов Д.В., Пойзнер Б.Н. // Тез. докл. 8-й международной конф. по радиационной физике и химии неорганических металлов. Томск: ТПУ, 1993. Ч. 1. С. 47.
5. Баканов С.П., Картаев Е.В. // Физика тв. тела: Тез. докл. IV Российской научн. студ. конф. (17–19 мая 1994 г.). Томск: Изд-во ТГУ, 1994. С. 30.
6. Сафьянов Д.В., Баканов С.П., Пойзнер Б.Н. // Тез. докл. 8-й международной конф. по радиационной физике и химии неорганических материалов. Томск, 1993. Ч. 1. С. 82.
7. Мальгота А.А., Бахир Х.М., Шиян А.А. // Физика и химия обработки материалов. 1991. N 3. С. 86–97.
8. Пат. 5006688 (США) / Michael A. Cross (USA). 09.04.91.: МКИ В 23 К 9106. Оpubл. в БИ. 1992. N 6.

Томский государственный университет

Поступила в редакцию  
26 июля 1995 г.

**S. P. Bakanov, B. N. Poisner. System «CO<sub>2</sub> Laser + Ion Source» as a Stimulator of Nonadditivity of the Processes on Metal Surface.**

The hypothesis about nonadditivity of simultaneous action (co-actions) and new synergetic peculiarities of the system «solid – plasma – energy flows» evolution are discussed. The structure of the program package for investigation of the evolution of target materials under different co-actions is observed. The prospects of computing creation of models stimulated by investigator's selection of different actions are also under discussion. The model is presented of metals (like W) thermooxidation by O-ion beam under laser irradiation as well as the model of laser-arc-lamp smelting of metals and tentative results of the simulation.