

# 强流脉冲电子束表面改性的物理模型及数值模拟\*

秦 颖, 吴爱民, 邹建新, 郝胜智, 刘 悦, 王晓钢, 董 闯

(大连理工大学 三束材料改性国家重点实验室, 物理系, 辽宁 大连 116024)

摘 要: 推导出了强流脉冲电子束处理过程的应力场方程, 利用数值模拟, 得到了温度场和应力场的分布曲线, 分别给出了熔化深度、升降温的速率及温度梯度的大小, 准静态应力和热应力波的幅值、应力波的传播及反射过程, 利用数值模拟结果对实验中观察到的实验现象——熔化深度、材料表层及次表层数微米范围内组织结构的变化及数百微米的硬度提高等给出了解释。

关键词: 强流脉冲电子束; 数值模拟; 热应力波

中图分类号: TM836; TL503 文献标识码: A

能量束(电子束、离子束、激光束)和等离子体等表面改性技术, 在短时间内提供很高的能量密度沉积在材料的表面, 这种辐射作用引起了材料表面的快速加热、熔化和蒸发以及随后的快速凝固, 这就能够使材料表面成分、组织结构和性能实现预期的变化<sup>[1~5]</sup>。这些高新技术涉及到高能密度物理、流体动力学、等离子体科学、热弹性力学和材料科学等许多领域。

利用俄罗斯 Nadezhda-2 强流脉冲电子束源, 我们先后进行了大量的实验研究, 如纯铝表面改性<sup>[6]</sup>, 对 Ti 离子注入 9Cr18 钢采用强流脉冲电子束进行表面后处理<sup>[7]</sup>, 纯铝的电子束表面渗碳以及对模具钢的表面强化处理等实验研究<sup>[8~9]</sup>。发现其热影响区为微米量级, 但改性深度达到数百 μm, 主要作用机制是应力波的产生与传播。由于温度场及应力场的瞬时性, 难以从实验上测定, 只能采用数值方法来模拟改性过程和后续的观察来进行推测。因此根据对大量实验现象的分析与总结, 通过理论分析, 建立了强流脉冲电子束(IPEB)处理过程热效应的物理模型, 并进行数值模拟。

## 1 物理模型

### 1.1 能量分布

电子在固体中穿行时具有一定的射程, 即电子在固体中的最大平均穿行距离。电子的射程是从碰撞表面到电子完全失去其能量的垂直距离, 它仅由电子的能量和物质的密度决定, 如下式所示<sup>[10]</sup>

$$r = 2.1 \times 10^{-12} U^2 / \rho, \quad 10\text{keV} \leq U \leq 100\text{keV} \quad (1)$$

其中  $r(\text{cm})$  是电子射程,  $U(\text{V})$  是加速电压,  $\rho(\text{g cm}^{-3})$  是材料的密度。

在沿着入射电子束深度方向上, 材料单位体积吸收的能量为  $g(x, t)$ , 由下式给出<sup>[2, 10]</sup>

$$g(x, t) = \frac{P(t)}{S r} f(x, r) \quad (2)$$

式中,  $P(t)$  为实测得到的电子束功率,  $S$  为电子束斑的面积,  $a$  是能量吸收系数。  $f(x, r)$  是单位体积吸收能量的分布函数, 如下式所示<sup>[10]</sup>

$$f(x, r) = 1 - \frac{9}{4} \left( \frac{x}{r} - \frac{1}{3} \right)^2, \quad 0 \leq x \leq r \quad (3)$$

式中:  $x$  为沿着入射电子束深度方向的坐标, 最外表面入射处取为坐标原点。

沉积的能量在最大射程的三分之一处达到最大值, 然后单调地下降到零。图 1 是在电子束加速电压为 28kV 轰击铝靶( $\rho = 2.7\text{g cm}^{-3}$ ) 条件下得到的单位体积吸收能量的分布函数。

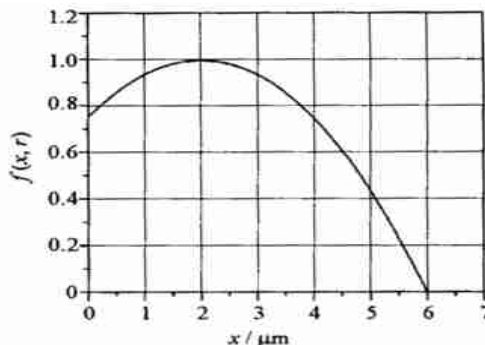


Fig. 1 Energy deposition ratio along the incidence depth  
图 1 单位体积吸收能量的分布函数

\* 收稿日期: 2002-10-09; 修订日期: 2003-03-25

作者简介: 秦 颖(1964+), 女, 博士生, 从事脉冲电子束材料改性机制及过程模拟研究; E-mail: qy-dl@sina.com.

## 1.2 温度分布

入射电子的能量之 90% 都要转化成热能,使靶极的温度升高。由热传导理论,电子束表面处理的热过程可以用含有热源的传热方程和反映与环境交互作用的边界条件来描述。由于我们所选取的试样的直径小于电子束斑的直径,可认为电子束截面分布为均匀的,试样截面的温度分布近似为均匀的,这样只考虑一维的温度分布,一维的主导传热方程可以描述为<sup>[2]</sup>

$$c(T) \frac{\partial T(x, t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} [k(T) \frac{\partial T(x, t)}{\partial x}] + g(x, t) + H \quad (4)$$

初始条件为  $T(x, 0) = T_0$ , 边界条件为  $-k(T) \frac{\partial T(x, t)}{\partial x} |_{x=0, x=l} = 0$ , 其中,  $\rho, c, k$  分别为材料的密度、比热容及热导率,  $T_0$  为材料的初始温度,  $l$  为工件的厚度。  $H$  为物相变化吸收或释放的潜热,可以折算成温度的补偿值,然后再与节点温度分步进行叠加。单位体积的金属在相变阶段由于潜热的吸收或释放而引起的温度补偿值为  $T = H/c$ 。

## 1.3 热应力的物理模型

当电子束轰击物体时,物体表面层吸收能量,表面温度急剧的变化产生了不均匀的热膨胀,因此在物体内产生了非正常热应力,如图 2 所示。由于温度变化剧烈,物体的变形速度很大,因此在模型推导过程中将热变形加速度考虑进去。因此推导出纵向的一维应力场的方程

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} = C^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} - R \frac{\partial^2 T}{\partial t^2} \quad (5)$$

式中:  $C^2 = v^2 \frac{1 - \mu}{(1 + \mu)(1 - 2\mu)}$  (6)

$$R = \frac{E}{1 - 2\mu} \quad (7)$$

初始条件为  $(x, 0) = 0, \partial(x, 0)/\partial t = 0$ ; 边界条件为  $(x, t) |_{x=0, x=l} = 0$ , 其中,  $\sigma$  为纵向的应力场,  $v$  是纵向声速,  $\mu$  为泊松比(金属取 0.25 ~ 0.3),  $\alpha$  为金属的线胀系数,  $C$  为无旋弹性波的传播速度,  $E$  为物体的弹性模量。

热应力的方程(5)描述了这样的物理过程:由于电子束轰击物体,表面产生了剧烈的温度变化,在纵向产生了热应力(式中第二项),该应力波会在物体内传播,遇到晶界等晶体缺陷时将产生反射和干涉。

由于纵向温度分布不均匀,除了在纵向产生了热应力波外,在横向也会产生准静态热应力<sup>[11]</sup>,其大小可以由下式估算

$$\sigma_y = \sigma_z = -\frac{E}{1 - \mu} T(x, t) + \frac{\mu}{1 - \mu} \sigma(x, t) \quad (8)$$

考虑到变形速度很高的情况下材料性质的改变,在模拟计算中,材料的热传导系数  $k(T)$  和比热容  $c(T)$ , 在不同物相下均采用随温度变化的函数。在小于 660 °C 条件下,  $E(T)$  也采用随温度变化的函数。

## 2 实验数值计算结果分析

### 2.1 温度分布与熔化深度

图 3 为脉冲宽度为 2  $\mu$ s、能量为 2.7 J/cm<sup>2</sup> 电子束轰击铝靶后试样内部温度分布的数值模拟结果,可以清楚地看到在脉冲宽度内,靶表面温度出现一个非常尖锐的峰值,说明在靶表面区域存在超快速温度变化与高梯度(10<sup>6</sup> ~ 10<sup>7</sup> K/m)的温度分布。材料表面 2  $\mu$ m 范围内发生了熔化,随后表面经历速率为 10<sup>8</sup> ~ 10<sup>9</sup> K/s 的冷却过程,冷却速率之快,使得熔化层与基体之间产生明显界限。

实验中所观测到的熔化深度与数值模拟的结果基本吻合。图 4 是电子束能量为 2.7 J/cm<sup>2</sup> 轰击 1 次后的透射电镜截面照片,从中可以清楚地观察到白亮表面重熔层,层厚约为 1  $\mu$ m。重熔层与基体之间有明显界限,没有共格取向关系,说明重熔层的凝固为重新形核长大过程,重熔层与基体之间的晶界呈凹凸起伏。为了清楚起见,在图中用点画线标出。

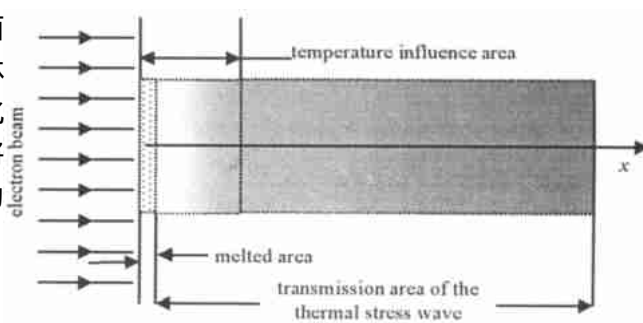


Fig. 2 Affected zones by the electron beam

图 2 电子束轰击影响区示意图

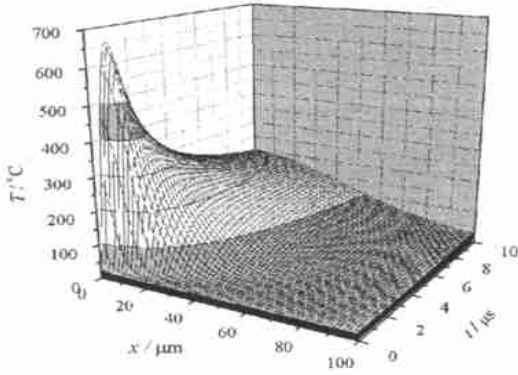


Fig. 3 Temperature distribution at different position and different time of pure aluminum

图 3 2.7J/cm<sup>2</sup> 电子束辐照后铝靶的温度分布及其演变

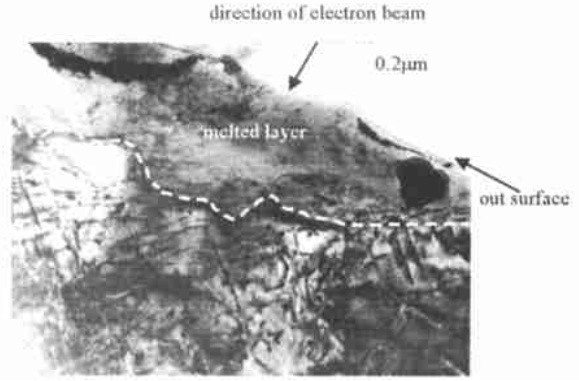


Fig. 4 Cross section TEM image showing the surface melted layer of Al bombarded with one pulse

图 4 截面透射电镜像,可见表面熔层约 1μm 厚。熔层与未熔基体界面明显,呈凹凸起伏

### 2.2 应力波与显微硬度

热应力波在传播过程中遇到晶界等晶体缺陷时将产生反射和干涉,为了考察热应力波的传播与反射过程,我们假定 200μm 处存在能够反射应力波的界面。图 5 中画出了 890ns 和 915ns 时的应力波形,890ns 时应力达到峰值(约位于 20μm 深度,图 5 中用直线标出),约为 0.2MPa,此时为拉应力。图 6 中画出应力最大值位置处的应力随时间的变化曲线,作傅里叶分析得出应力波的振动频率为 10<sup>6</sup> ~ 10<sup>8</sup>Hz,即在 1μs 的时间内,应力变化数十次甚至上百次。

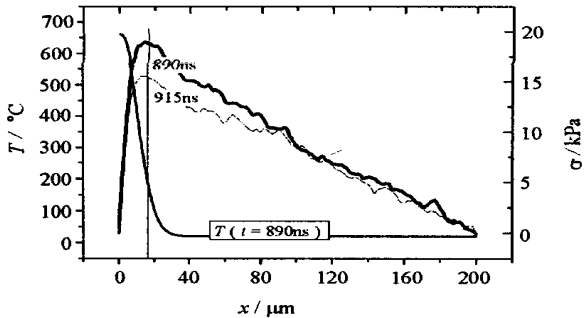


Fig. 5 Superimposed stress wave after transmission and reflection

图 5 2.7J/cm<sup>2</sup> 电子束辐照铝靶后应力波传播与反射叠加波形

图 7 是脉冲能量为 2.7J/cm<sup>2</sup> 电子束轰击一次后试样截面上显微硬度随深度的分布,最外表面的显微硬度变化很小,大约在 30μm 的深度附近硬度出现峰值。

虽然数值模拟计算出的纵向热应力波幅值是较小的,约在 0.2MPa 的量级,但由式(13)估算得出的材料近表面层准静态热应力为压应力,其幅值在几百 MPa (实验结果给出,纯铁经 HCPEB 轰击后,表面准静态应力达到 400MPa 左右<sup>[5]</sup>)。横向的准静态压应力远远超过了纵向热应力波的幅值,正是在这种准静态压应力和表面一定范围内变频变幅的小幅热应力波的高频振荡作用下,使得材料内部产生缺陷的阈值将大大下降<sup>[5]</sup>。热冲击所导致的改性层硬度分布曲线大致与位错密度分布曲线相一致<sup>[4,5]</sup>,这就说明位错的大量增殖是改性层硬度产生变化的根源。对于实际的强流脉冲电子束表面改性过程,热应力波和准静态应力与材料中的位错、晶界、点缺陷等的相互作用过程是极为复杂的,

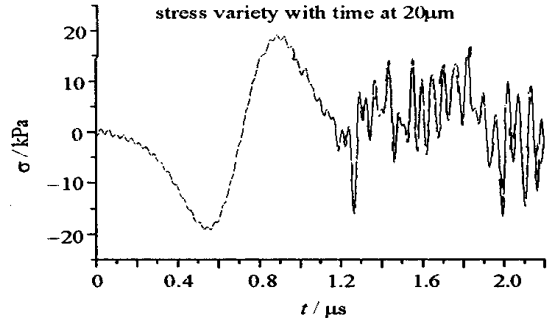


Fig. 6 Stress wave variety with time at 20μm depth

图 6 2.7J/cm<sup>2</sup> 电子束辐照铝靶后在 20μm 处应力随时间变化

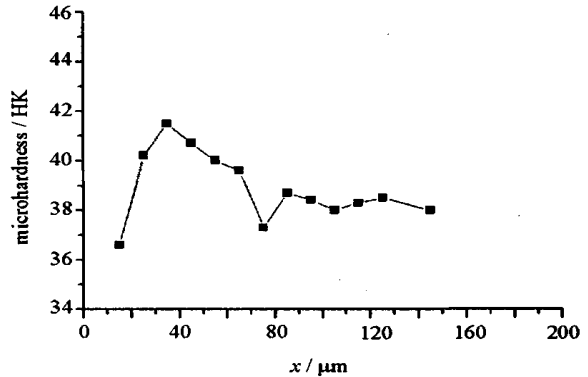


Fig. 7 Typical microhardness profile for specimens treated with one pulse

图 7 电子束单次轰击试样截面上显微硬度分布

还有待于进一步的深入研究。

### 3 结 论

我们推出了脉冲电子束体内加热一维的温度场与一维非定常热应力波的物理模型,同时给出准静态应力的估算方程,并通过实验结果加以验证,该模型对强流脉冲电子束表面改性的实际应用具有重要的指导意义。

该模型能够给出熔化深度、升降温速率、温度梯度、应力波在时间和空间上的分布,以及准静态应力的大小等重要数据,这些数据可通过控制电子脉冲源的脉冲宽度、能量和轰击次数等来控制。在典型的处理工艺条件下(脉宽  $2\mu\text{s}$ 、能量为  $2.7\text{J}/\text{cm}^2$ 、轰击 1 次),纯铝的表面熔化层厚度约为  $2\mu\text{m}$ ,升降温速率  $10^8 \sim 10^9\text{K}/\text{s}$ ,温度在  $1\mu\text{s}$  时达到最大值,此时靶表面温度梯度高达  $10^6 \sim 10^7\text{K}/\text{m}$ 。材料近表面层准静态热应力为压应力,其幅值在几百 MPa。这些计算结果印证了透射电镜截面照片中的重熔层、次表面层硬度极大现象和改性层的深度远大于温度影响区等实验结果。

### 参考文献:

- [1] 乐小云,赵渭江,颜莎,等.强脉冲离子束辐照金属材料表面热力学效应计算[J].强激光与粒子束,2001,13(4):456—460. (Le X Y, Zhao W J, Yan S, et al. Computer simulation of thermal - mechanical effects of High Intense Pulsed Ion Beam on metal surface. *High Power Laser and Particle Beams*, 2001, 13(4): 456—460)
- [2] Proskurovsky D I, Rotshtein V P, Ozur G E, et al. Pulsed electron-beam technology for surface modification of metallic materials[J]. *J Vac Sci Technol A*, 1998, 16(4): 2480—2488.
- [3] Pogrebniak A D, Bratushka S, Boyko V I, et al. A review of mixing processes in Ta/ Fe systems treated by high current electron beams[J]. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B*, 1998, 145: 373—390.
- [4] Pogrebniak A D, Ladysev V S, Pogrebniak N A, et al. A comparison of radiation damage and mechanical and tribological properties of  $\alpha$ -Fe exposed to intense pulsed electron and ion beams[J]. *Vacuum*, 2000, 58: 45—52.
- [5] Proskurovsky D I, Rotshtein V P, Ozur G E, et al. Physical foundations for surface treatment of materials with low energy, high current electron beams[J]. *Surface and Coatings Technology*, 2000, 125: 49—56.
- [6] Hao S Z, Yao S, Guan J, et al. Surface treatment of aluminum by high current pulsed electron beam[J]. *Current Applied Physics*, 2001, 1:203—208.
- [7] 刘振民,郝胜智,董闯,等. Ti 离子注入 9Cr18 钢后采用强流脉冲电子束进行表面改性的研究[J].核技术,2000,23(7):447—451. (Liu Z M, Hao S Z, Dong C, et al. Post-treatment of Ti-implanted 9Cr18 steel using pulsed high current electron beam (PHCEB). *Nuclear Technology*, 2000, 23(7): 447—451)
- [8] Dong C, Wu A M, Hao S Z, et al. Surface treatment by high current pulsed electron beam[J]. *Surface and Coatings Technology*, 2003, 163—164, 620—624.
- [9] 吴爱民,陈景松,董闯,等.模具钢电子束表面改性研究[J].核技术,2002,25(8):608—614. (Wu A M, Chen J S, Dong C, et al. A study on the die steel surface modification by electron beam. *Nuclear Technology*, 2002, 25(8): 608—614)
- [10] Schiller S, Heisig U, Panzer S. Electron Beam Technology[M]. A Wiley-Interscience Publication, 1982. 29—42.
- [11] 严宗达,王洪礼.热应力[M].北京:高等教育出版社,1993. (Yan Z D, Wang H L. Thermal stress. Beijing: Higher Education Press, 1993)

## Physical model and numerical simulation of intense pulsed electron beam surface modification

QIN Ying, WU Ai-min, ZOU Jian-xin, HAO Sheng-zhi, LIU Yue, WANG Xiao-gang, DONG Chuang  
(State Key Laboratory for Materials Modification by Laser, Ion and Electron Beam, Department of Physics,  
Dalian University of Technology, Dalian 116024, China)

**Abstract:** A one-dimension temperature and stress model is proposed based on the beam-target interaction process and thermal-elastic theory for the intense pulsed electron beam treatment. The temperature and stress profiles are derived by the numerical simulation. According to the simulation, the melted layer is about 2000nm in depth, the rate of rapid heating and cooling reaches  $10^8 \sim 10^9\text{K}/\text{s}$ , the amplitude of quasi-static thermal stress is about several hundreds MPa, the vibratory frequency of thermal stress wave is about  $10^6 \sim 10^8\text{Hz}$ . The simulation explains satisfactorily the observed experimental phenomena as the surface melting depth and the depth distribution of microhardness.

**Key words:** Intense pulsed electron beams (IPEB); Numerical simulation; Thermal stress wave