

P11-2005-83

И. В. Амирханов, А. Ю. Дидык, Н. Р. Саркар, И. Сархадов,  
В. К. Семина, А. Хофман\*, З. А. Шарипов

ПРИМЕНЕНИЕ МОДЕЛИ ТЕРМИЧЕСКОГО ПИКА  
ДЛЯ РАСЧЕТА ТЕМПЕРАТУРЫ  
В ДВУСЛОЙНЫХ СТРУКТУРАХ  
ВДОЛЬ ПРОЕКТИВНОГО ПРОБЕГА  
ТЯЖЕЛОГО ИОНА ВЫСОКОЙ ЭНЕРГИИ

Направлено в журнал «Письма в ЭЧАЯ»

---

\*Институт атомной энергии, Свек, Польша, e-mail: Hofman@jinr.ru

Амирханов И. В. и др.

P11-2005-83

Применение модели термического пика для расчета температуры в двухслойных структурах вдоль проективного пробега тяжелого иона высокой энергии

Модель термического пика в трехмерном случае применена для расчета температур в структуре, состоящей из двух слоев различных материалов. Системы уравнений для температур электронного газа и решетки для обоих слоев решены численно в аксиально-симметричной цилиндрической системе координат при постоянных значениях теплоемкостей и теплопроводностей на примере системы Ni(2 мкм)/W. На основе полученных результатов можно сделать вывод о том, что при облучении двухслойного материала Ni(2 мкм)/W ионами с энергией 710 МэВ могут происходить фазовые переходы: плавление в обоих слоях, а испарение только в слое Ni (первом слое). Оценены максимальные радиусы и глубины областей, где происходят процессы плавления (слой Ni и W) и испарения (слой Ni).

Работа выполнена в Лаборатории информационных технологий и Лаборатории ядерных реакций им. Г. Н. Флерова ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна, 2005

Amirkhanov I. V. et al.

P11-2005-83

The Use of Thermal Peak Model for Temperature Calculation in Two-Layer Structures along the Projected Range of High Energy Heavy Ion

The thermal spike model in the three-dimensional case is used for the calculation of temperatures in the structure consisting of two layers of different materials. The systems of equations for electron gas and lattice temperatures are solved numerically in the axial-symmetric coordinate system at the constant values of specific capacities and thermal conductivities for the Ni(2  $\mu\text{m}$ )/W two-layer system. One can conclude on the basis of the obtained results that phase transitions can take place in the case of irradiation of the Ni(2  $\mu\text{m}$ )/W two-layer structure by Bi ions with an energy of 710 MeV: melting — in both layers, evaporation — only in the Ni layer (first layer). The maximum radii and depths where the melting (Ni and W layers) and evaporation (Ni layer) processes occur are calculated.

The investigation has been performed at the Laboratory of Information Technologies and Flerov Laboratory of Nuclear Reactions, JINR.

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna, 2005

## ВВЕДЕНИЕ

В последние годы значительные усилия были направлены на создание структур, представляющих собой достаточно тонкое (до нескольких микрометров и более толстых) покрытие, нанесенное на материал подложки [1–3]. Такая структура в ряде случаев позволяет улучшить коррозионные, теплофизические и электрофизические свойства, а также повысить износостойкость изделий из двуслойных материалов при сохранении механических свойств, присущих подложке. Часто такие материалы не смешиваются один с другим [2, 3]. Поэтому задача увеличения коэффициента адгезии, т. е. взаимного перемешивания компонент таких структур представляется весьма важной. В частности, в ряде работ для увеличения взаимного перемешивания компонент вблизи границы раздела используются тяжелые высокоионизирующие частицы — ионы с высокими удельными ионизационными потерями энергии и пробегами, заведомо превышающими толщину нанесенного покрытия [1, 4]. При таком воздействии за счет высоких ионизационных потерь энергии  $S_{\text{inel}} = - \left( \frac{\partial E}{\partial z} \right)_{\text{inel}}$  иона, прошивающего оба слоя, и последующего разогрева области вдоль траектории иона в рамках модели термического пика [5–9], происходит резкое возрастание температуры и, как следствие, увеличение взаимного перемешивания компонент (адгезии) [1, 4]. Интерес к изучению таких процессов обусловлен особенностями радиационных изменений в материалах, которые имеют не только большое фундаментальное значение для понимания основных закономерностей взаимодействия тяжелых заряженных частиц с конденсированными средами, но также важны для прикладных целей, а именно для использования данных эффектов в развитии новых технологий и совершенствования уже имеющихся.

Целью настоящей работы является применение модели теплового пика [5–9] для вычисления температуры решетки ( $T_i$ ) и электронов ( $T_e$ ) в случае двуслойных систем.

## 1. МОДЕЛЬ ТЕРМИЧЕСКОГО ПИКА В ДВУСЛОЙНЫХ МАТЕРИАЛАХ

Основными механизмами процессов образования треков тяжелых ионов в диэлектрических материалах являются модели кулоновского взрыва и термического пика [7, 8]. Помимо этого, модель термического пика была эффективно использована для объяснения процессов неупругого распыления мелкодисперсных материалов [9–12].

Треком тяжелой заряженной частицы принято называть сильно деструктурированную область вокруг траектории тяжелого иона в материале, созданную за счет температурных эффектов, вызванных ионизационными потерями энергии  $S_{\text{inel}} = - \left( \frac{\partial E}{\partial z} \right)_{\text{inel}}$ , приводящих к расплавлению и последующей возможной частичной рекристаллизации или аморфизации этой области.

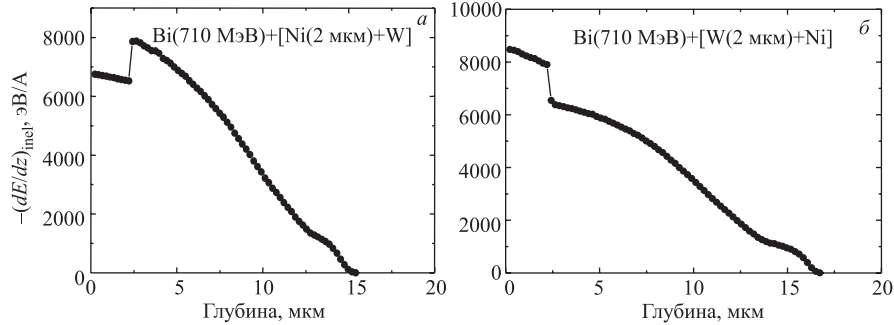


Рис. 1. Зависимость удельных ионизационных потерь энергии  $S_{\text{inel}} = - \left( \frac{\partial E}{\partial z} \right)_{\text{inel}}$  ионов  $^{209}\text{Bi}$  с энергией 710 МэВ от глубины в двуслойных структурах: Ni(2 мкм)/W (а) W(2 мкм)/Ni (б)

На рис. 1 представлена зависимость удельных ионизационных потерь энергии  $S_{\text{inel}} = - \left( \frac{\partial E}{\partial z} \right)_{\text{inel}}$  для ионов  $^{209}\text{Bi}$  с энергией 710 МэВ от глубины в двуслойных мишенях, а именно для мишени из вольфрама, покрытого слоем никеля с толщиной 2 мкм (а) и для мишени из никеля, покрытого слоем вольфрама с толщиной 2 мкм (б).

Электроны с энергией, превышающей энергию Ферми ( $E_F$ ), передают свою энергию «холодным» электронам за счет электрон-электронного рассеяния. Характерное время этого процесса ( $\tau_{\text{th}}$ ) примерно на порядок меньше времени охлаждения электронов вследствие электронной теплопроводности, т. е.  $\tau_{\text{th}} \ll \tau_{\chi} = \frac{r_0^2}{\chi_e}$ , где  $\chi_e$  — теплопроводность электронного газа [13]. Следовательно, процесс остывания «горячих» электронов можно описать уравнением теплопроводности [14–17]. Рассеяние «горячих» электронов на атомах в узлах решетки приводит к повышению решеточной температуры. Характерное время теплопередачи от электронов решетке ( $\tau_L$ ) удовлетворяет условию  $\tau_L \gg \tau_{\chi}$ .

В работе [13] вычисление температуры решетки было проведено сле-

дующим образом: вначале было рассмотрено охлаждение «горячих» электронов вследствие электронной теплопроводности, а затем пространственно-временной профиль электронной температуры  $T_e(r, t)$  был использован для вычисления температуры решетки применительно к кристаллическим и аморфным структурам.

В отличие от этого подхода, в более ранних работах [16–19] была введена система двух связанных уравнений в частных производных для температур электронов  $T_e(r, t)$  и решетки  $T_i(r, t)$ . Данная система уравнений в настоящее время достаточно широко применяется для численных вычислений и оценок температуры решетки в «треке» тяжелого иона (см., например, [5, 6, 20–22]).

С учетом аксиальной симметрии неупругих потерь энергии тяжелого иона высокой энергии  $S_{\text{inel}} = - \left( \frac{\partial E}{\partial z} \right)_{\text{inel}}$  системы уравнений для определения решеточной и электронной температур в цилиндрической системе координат в обоих слоях может быть записана в виде, полученном без функции источника  $A_\nu(r, z, t)$  в основополагающих работах [16–19] и с такой функцией [4–6, 21]:

$$C_{e,\nu}(T_{e,\nu}) \frac{\partial T_{e,\nu}}{\partial t} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \chi_{e,\nu}(T_{e,\nu}) \frac{\partial T_{e,\nu}}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( \chi_{e,\nu}(T_{e,\nu}) \frac{\partial T_{e,\nu}}{\partial z} \right) - g_\nu (T_{e,\nu} - T_{i,\nu}) + A_\nu(r, z, t), \quad (1)$$

$$C_{i,\nu}(T_{i,\nu}) \frac{\partial T_{i,\nu}}{\partial t} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \chi_{i,\nu}^{\parallel}(T_{i,\nu}) \frac{\partial T_{i,\nu}}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( \chi_{i,\nu}^{\perp}(T_{i,\nu}) \frac{\partial T_{i,\nu}}{\partial z} \right) + g_\nu (T_{e,\nu} - T_{i,\nu}). \quad (2)$$

В уравнениях (1) и (2) индекс  $\nu = 1$  относится к материалу покрытия или первого слоя (т. е. при изменении координаты  $z$  в интервале  $0 \leq z \leq H$ ) и индекс  $\nu = 2$  относится к материалу подложки или второго слоя. В уравнениях (1)–(2)  $T_{e,1}(r, z, t)$ ,  $T_{i,1}(r, z, t)$  и  $T_{e,2}(r, z, t)$ ,  $T_{i,2}(r, z, t)$  — температуры электронного газа и решетки в обоих слоях соответственно, а  $c_{e,\nu}(T_{e,\nu})$  и  $\chi_{e,\nu}(T_{e,\nu})$  и  $c_{i,\nu}(T_{i,\nu})$  и  $\chi_{i,\nu}^{\parallel,\perp}(T_{i,\nu})$  — теплоемкости и теплопроводности электронного газа и решеток (с индексами  $\nu = 1, 2$ ). В общем случае для монокристаллических материалов подложки и нанесенного слоя теплопроводности могут зависеть от кристаллографических направлений. Здесь ось  $z$  направлена перпендикулярно плоскости мишени, т. е. по направлению движения тяжелого иона, производная по углу отсутствует ввиду цилиндрической симметрии.  $g_1$  и  $g_2$  — константы электрон-фононного взаимодействия в первом слое и материале подложки соответственно.

Систему (1)–(2) решаем со следующими начальными и граничными условиями и с условиями сопряжения на разделе двух материалов.

*Начальные условия*

$$T_{e,\nu}(r, z, t = 0) = T_0, \quad T_{i,\nu}(r, z, t = 0) = T_0, \quad (3)$$

где  $\nu = 1, 2$ ,  $0 < r < R_{\max}$ ,  $0 < z < Z_{\max}$  и  $T_0 = 300$  К.

*Граничные условия*

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial T_{e,\nu}(r, z, t)}{\partial r} \right|_{r=0} &= 0, \quad \left. \frac{\partial T_{i,\nu}(r, z, t)}{\partial r} \right|_{r=0} = 0, \\ T_{e,\nu}(r = R_{\max}, t) &= T_0, \quad T_{i,\nu}(r = R_{\max}, t) = T_0, \\ \text{где } 0 < z < Z_{\max}, \quad 0 < t < t_{\max}. \end{aligned} \quad (4)$$

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial T_{e,1}(r, z, t)}{\partial z} \right|_{z=0} &= 0, \quad \left. \frac{\partial T_{i,1}(r, z, t)}{\partial z} \right|_{z=0} = 0, \\ T_{e,2}(r, z = Z_{\max}, t) &= T_0, \quad T_{i,2}(r, z = Z_{\max}, t) = T_0, \\ \text{где } 0 < r < R_{\max}, \quad 0 < t < t_{\max}. \end{aligned}$$

*Условия сопряжения на границе раздела двух материалов*

Условия сопряжения на границе раздела двух материалов можно ввести двумя способами:

а) идеальный контакт:

$$\begin{aligned} T_{e,1}(r, z = H - 0, t) &= T_{e,2}(r, z = H + 0, t), \\ T_{i,1}(r, z = H - 0, t) &= T_{i,2}(r, z = H + 0, t), \\ \chi_{e,1}(T_{e,1}) \frac{\partial T_{e,1}(r, z = H - 0, t)}{\partial z} &= \chi_{e,2}(T_{e,2}) \frac{\partial T_{e,2}(r, z = H + 0, t)}{\partial z}, \\ \chi_{i,1}(T_{i,1}) \frac{\partial T_{i,1}(r, z = H - 0, t)}{\partial z} &= \chi_{i,2}(T_{i,2}) \frac{\partial T_{i,2}(r, z = H + 0, t)}{\partial z}, \end{aligned} \quad (5)$$

где  $0 < r < R_{\max}$ ,  $0 < t < t_{\max}$ .

Эти условия означают непрерывность температуры и теплового потока на границе раздела двух материалов при  $z = H$ .

б) не идеальный контакт:

$$\begin{aligned}
-\chi_{e,1}(T_{e,1}) \frac{\partial T_{e,1}(r, z = H - 0, t)}{\partial z} &= \theta [T_{e,1}(r, z = H - 0, t) - \\
&- T_{e,2}(r, z = H + 0, t)], \\
-\chi_{e,2}(T_{e,2}) \frac{\partial T_{e,2}(r, z = H + 0, t)}{\partial z} &= \theta [T_{e,1}(r, z = H - 0, t) - \\
&- T_{e,2}(r, z = H + 0, t)], \\
-\chi_{i,1}(T_{i,1}) \frac{\partial T_{i,1}(r, z = H - 0, t)}{\partial z} &= \theta [T_{i,1}(r, z = H - 0, t) - \\
&- T_{i,2}(r, z = H + 0, t)], \\
-\chi_{i,2}(T_{i,2}) \frac{\partial T_{i,2}(r, z = H + 0, t)}{\partial z} &= \theta [T_{i,1}(r, z = H - 0, t) - \\
&- T_{i,2}(r, z = H + 0, t)],
\end{aligned} \tag{6}$$

где  $0 < r < R_{\max}$ ,  $0 < t < t_{\max}$ ;  $\theta$  — эффективный коэффициент передачи энергии.

Далее предполагаем, что  $R_p < Z_{\max} \leq l_p$ ,  $H < R_p$ , где  $R_p$  — длина проективного пробега иона;  $l_p$  — толщина подложки;  $R_{\max}$  — минимальный радиус удаления от траектории иона, а  $Z_{\max}$  — минимальная глубина, превышающая длину проективного пробега иона, при которой решетку можно считать невозмущенной, а ее температуру при  $r > R_{\max}$  и  $z > Z_{\max}$  равной  $T_0$ .

В общем случае функции  $A_\nu(r, z, t)$  — объемные плотности вносимых ионом мощностей в слоях и могут быть представлены в виде наиболее часто используемых выражений [23, 24]:

$$A_\nu(r, z, t) = b_\nu \cdot S_{inel\nu} \exp\left[\frac{-(t - t_{0\nu})^2}{2\sigma_{t\nu}^2}\right] \exp\left(-\frac{r}{r_{0\nu}}\right). \tag{7}$$

Так как значения ионизационных потерь энергии тяжелого иона в материале покрытия и подложки различаются в пределах, не превышающих, как правило, одного порядка величины, то численные значения величин  $t_{0\nu}$ ,  $\sigma_{t\nu}$  и  $r_{0\nu}$  для  $\nu = 1, 2$  будем считать одинаковыми. Время достижения электронами равновесного распределения  $t_0$ , то есть время свободного пробега  $\delta$ -электронов со средней энергией  $\varepsilon_e$ ,  $t_0 \approx (1-5) \cdot 10^{-15}$  с. Полуширина распределения по  $t$  принята равной  $\sigma_{t\nu} = t_0$  [25]. Скорость экспоненциального спада или пространственная ширина высоковольтной области  $r_0 \leq 2,5$  нм [24] или же  $r_0 \cong 1$  нм [13]. Нормировочный множитель  $b_\nu$

определяется из условий нормировки:

$$\int_0^{\infty} dt \int_0^{r_m} 2\pi r A_{\nu}(r, z, t) dr = S_{\text{inel}\nu} \equiv - \left( \frac{\partial E}{\partial z} \right)_{\text{inel}\nu}(z);$$

здесь  $r_m$  — максимальный пробег  $\delta$ -электронов, зависящий от максимальной энергии  $\varepsilon_m$ , передаваемой отдельному электрону [13, 25]. Откуда после интегрирования в условии нормировки имеем (считая, что  $r_{m1} \approx r_{m2}$ ) [21]:

$$b_{\nu} = \{(2\pi)^{3/2} 0,84134 r_{0\nu}^2 t_0 [1 - \exp(-r_m/r_{0\nu})(1 + r_m/r_{0\nu})]\}^{-1}.$$

Тогда при  $r_m/r_0 \gg 1$  находим

$$b_{\nu} = \{(2\pi)^{3/2} 0,84134 r_{0\nu}^2 t_0\}^{-1}.$$

Таким образом, мы можем решать следующие две задачи, т. е. а) задачу с идеальным контактом (1)–(5), б) задачу с не идеальным контактом (1)–(4) и (6).

## 2. ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ

Моделирование динамики фазовых переходов типа плавления или затвердевания приводит к задаче Стефана для фазовых переходов первого рода. Решение этой задачи сводится к решению системы (1)–(2) в области с неизвестной подвижной поверхностью  $\xi = \xi(r, z, t)$ , которая разделяет твердую и жидкую фазы. Эта поверхность называется изотермической поверхностью

$$T_{i,\nu}(r, z, t) = T_{\text{пл}}, \quad (8)$$

где  $T_{\text{пл}}$  — температура плавления.

Скорость распространения изотермической поверхности вычисляется следующим образом [26]:

$$v = - \frac{1}{H_T} \frac{\partial T_{i,\nu}}{\partial t}, \quad (9)$$

где  $H_T = \frac{\partial T_{i,\nu}}{\partial n} = |\nabla T_{i,\nu}|$ .

На межфазовой поверхности должно выполняться так называемое условие Стефана [27]:

$$\chi_{i,\nu,1} |\nabla T_{i,\nu,1}| - \chi_{i,\nu,2} |\nabla T_{i,\nu,2}| = \pm L_{\nu} \rho_{\nu,2} v, \quad (10)$$

где индекс 1 соответствует жидкой фазе, а 2 — твердой фазе;  $L_{\nu}$  — удельная теплота плавления материала ( $L_1$  относится к материалу покрытия,  $L_2$  —



к материалу подложки);  $\rho_{\nu,2}$  — плотность материала. Знаки должны быть выбраны так, чтобы они соответствовали рассматриваемой задаче. Таким образом, задачу фазовых переходов можем решать, добавляя условие (10) к задачам а) и б) предыдущего раздела.

В работах [28, 29] разработан метод численного решения задачи Стефана (фазовый переход типа плавления-затвердевания), а в [30, 31] изучен процесс испарения для металлического образца, облучаемого сильноточным источником ионов углерода.

Испарение вещества возможно только с поверхности первого слоя, а нагревание второго слоя до температур испарения может привести, в том числе, к частичному отслаиванию нанесенного первого слоя от второго слоя за счет возникающего давления во втором слое на границе раздела. То есть такой процесс будет напоминать явления типа блистеринга и флекинга на поверхности первого слоя в особенности при его относительно небольшой толщине по сравнению с пробегом тяжелого иона

Для оценок скорости испарения атомов с поверхности можно использовать выражение, приведенное в работе [32] для числа атомов, испаренных с поверхности твердого тела в зависимости от температуры поверхности в следующем виде:

$$\frac{dn}{dt} = \nu 3,5 \cdot 10^{22} P_1(T_{1,1}) / \{M_i T_{1,1}\}^{1/2} \text{ атом/см}^2 \cdot \text{с},$$

где  $\nu$  — вероятность прилипания атома металла к поверхности (sticking probability);  $P_1(T_{1,1})$  — равновесное давление пара (торр) при температуре  $T_{1,1}$ (К);  $M_i$  — атомный вес атома решетки. Обычно [32] значение параметра  $\nu \approx 0,6-0,9$ . При значении параметра  $\nu = 1$  в этой работе представлены зависимости давления испарения (vapour pressure data) и коэффициента испарения от температуры для ряда веществ, а именно для W, Ta, Nb, Mo, C, V, Ni, Fe и Cr. Равновесное давление паров для металлов хорошо известно [32] и может быть записано как

$$P(T) = P_0 \exp[-\Delta/(k_B \cdot T)],$$

где  $\Delta$  — теплота сублимации, слабо зависящая от температуры [32, 33].

В работе [34] развита модель для распыления на основе вспышки упругих столкновений (elastic-collision spike), которая далее называется стандартной теорией температурной вспышки [35]. Выражение для скорости испарения атомов с поверхности, введенное в работе [34], использовано для объяснения экспериментальных результатов в области высоких ионизационных потерь энергии в [36]:

$$dn/dt(r, t) = N[k_B \cdot T(r, t)/(2\pi M_i)]^{1/2} \exp[-U_0/(k_B \cdot T(r, t))].$$

Здесь  $N$  — число атомов в единице объема первого слоя в жидкой фазе;  $U_0$  — энергия связи атомов на поверхности жидкости, которая может быть оценена как  $\sim 1$  эВ [36, 37].

При торможении быстрой тяжелой заряженной частицы иона в конденсированных средах такая частица теряет свою энергию на возбуждение электронов и ионизацию атомов решетки. Удельные неупругие потери энергии ускоренного иона  $S_{\text{inel},\nu}(z) = - \left( \frac{\partial E}{\partial z} \right)_{\text{inel},\nu}$  составляют десятки кэВ/нм, а плотности возбужденных электронов в цилиндрической области с диаметром  $100 \text{ \AA}$  могут быть порядка  $10^{20} \text{ см}^{-3}$  и выше. Процессы релаксации энергии возбужденных электронов следующие: электрон-электронное рассеяние (время релаксации порядка  $\tau_{\text{th}} \approx 10^{-15} - 10^{-13}$  с); электрон-решеточная релаксация (время релаксации порядка  $\tau_{\chi} \approx 10^{-13} - 10^{-12}$  с); фонон-фононное рассеяние (время релаксации порядка  $\tau_L \approx 10^{-12}$  с). Введение термодинамического понятия температуры решетки и описание процессов перераспределения температуры с помощью уравнения теплопроводности с равновесными значениями термодинамических параметров возможно в случае, когда атомы решетки образуют статистически-равновесный ансамбль, т.е. при временах порядка  $10^{-12}$  с.

А для времен, меньших  $10^{-12}$  с, следует использовать иную температурную модель, учитывающую волновой характер переноса тепловой энергии (см., например, [38–40]).

### 3. МЕТОД ЧИСЛЕННОГО РЕШЕНИЯ

При решении системы уравнений (1), (2) с начальным условием (3), граничным условием (4) и условием сопряжения (5) предполагалось, что в кристалле нет анизотропии (т.е.  $\chi_{i,\nu}^{\parallel}(T_{i,\nu}) = \chi_{i,\nu}^{\perp}(T_{i,\nu}) = \chi_{i,\nu}(T_{i,\nu})$ ) и теплофизические параметры  $C$  и  $\chi$  не зависят от температуры (т.е. значения теплоемкости и теплопроводности выбираем при комнатной температуре). Целесообразно ввести безразмерные переменные, а именно:

$$\overline{T_{e,\nu}} = T_{e,\nu}/T_0, \quad \overline{T_{i,\nu}} = T_{i,\nu}/T_0, \quad \overline{r} = r/\Delta r, \quad \overline{z} = z/\Delta z, \quad \overline{t} = t/\Delta t,$$

где  $\Delta r$ ,  $\Delta z$  и  $\Delta t$  — единицы измерения расстояния и времени. Эти единицы выбираем в виде  $\Delta t = \alpha_1 t_0$  и  $\Delta r = \Delta z = \alpha_2 r_0$ . Здесь  $\alpha_1, \alpha_2$  — произвольные безразмерные константы. Значения этих констант положим равными:  $\alpha_1 = \alpha_2 = 100$ . Тогда систему уравнений (1), (2) можно записать в виде (верхние черты над безразмерными величинами для простоты опущены):

$$\frac{\partial T_{e,\nu}}{\partial t} = k_{e,\nu} \left( \frac{1}{r} \frac{\partial T_{e,\nu}}{\partial r} + \frac{\partial^2 T_{e,\nu}}{\partial r^2} + \frac{\partial^2 T_{e,\nu}}{\partial z^2} \right) - g_{\nu} (T_{e,\nu} - T_{i,\nu}) + A_{\nu}(r, z, t), \quad (11)$$

$$\frac{\partial T_{i,\nu}}{\partial t} = k_{i,\nu} \left( \frac{1}{r} \frac{\partial T_{i,\nu}}{\partial r} + \frac{\partial^2 T_{i,\nu}}{\partial r^2} + \frac{\partial^2 T_{i,\nu}}{\partial z^2} \right) + g_\nu (T_{e,\nu} - T_{i,\nu}), \quad (12)$$

где  $k_{\beta,\nu} = \chi_{\beta,\nu}(T_0)\alpha_1 t_0 / [C_{\beta,\nu}(\alpha_2 t_0)^2]$ ,  $g_{\beta,\nu} = g_\nu \alpha_1 t_0 / C_{\beta,\nu}$ , а индекс  $\beta = e, i$ . Аналогично переписываются условия (3), (4) и (5). Значения физических параметров взяты из работы [41]. Как в предыдущей работе [22], выбирая равномерную сетку, задачу (1)–(5) решаем явной схемой [42].

#### 4. ЧИСЛЕННЫЙ АНАЛИЗ И ОБСУЖДЕНИЕ ЕГО РЕЗУЛЬТАТОВ

Решая систему уравнений (11), (12) с начальными условиями (3), граничным условием (4) и условием сопряжения (5), мы привели временные и координатные зависимости температур электронного газа  $T_{e,\nu}(r, z, t)$  и решетки  $T_{i,\nu}(r, z, t)$  для двуслойных материалов.

На рис. 2 представлены зависимости электронных и решеточных температур в слоях Ni и W в двуслойной структуре вдоль проективного пробега

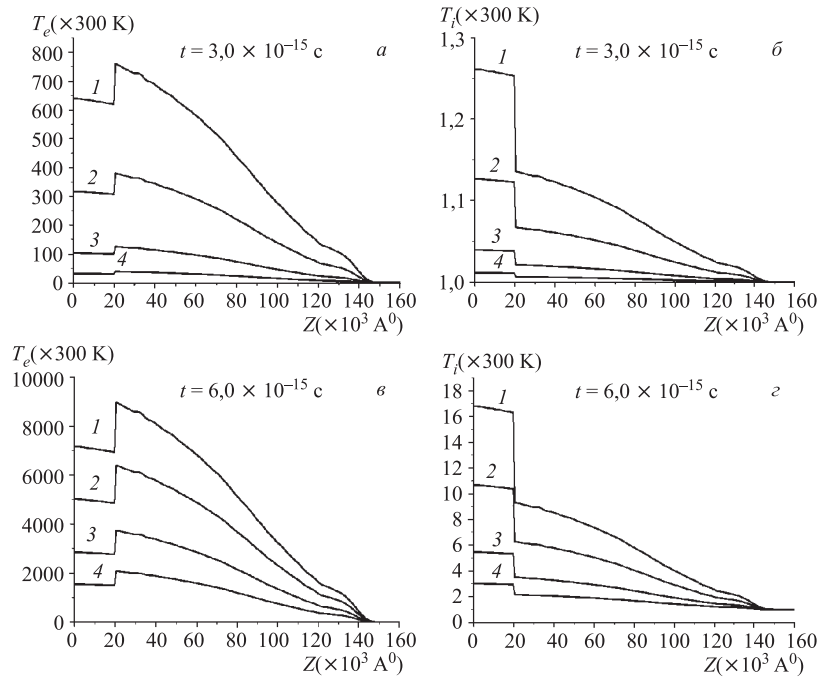


Рис. 2. Зависимости электронных и решеточных температур в слоях от глубины  $z$

иона от глубины  $z$  в двуслойной мишени Ni(2 мкм)/W для двух моментов времени  $t_1 = 3 \cdot 10^{-15}$  с,  $t_2 = 6 \cdot 10^{-15}$  с и при четырех значениях расстояния от оси трека  $r = 0; 25 \text{ \AA}, 50 \text{ \AA}, \text{ и } 75 \text{ \AA}$  (соответственно кривые 1–4).

Видно, что зависимость электронной температуры от глубины в двуслойной мишени напоминает профиль удельных ионизационных потерь энергии тяжелого иона (см. рис. 1, *a*). В то же время для слоя Ni температура в слое превышает температуры в подложке и растет быстрее из-за соотношений коэффициентов, характеризующих тепловые процессы. Следует отметить, что уже при времени  $t_2 = 6 \cdot 10^{-15}$  с температура в слое Ni уже превышает температуру плавления.

На рис. 3 представлены зависимости от времени температуры электронного газа и решетки на различных расстояниях от траектории  $r = 0; 25 \text{ \AA}, 50 \text{ \AA}$ .

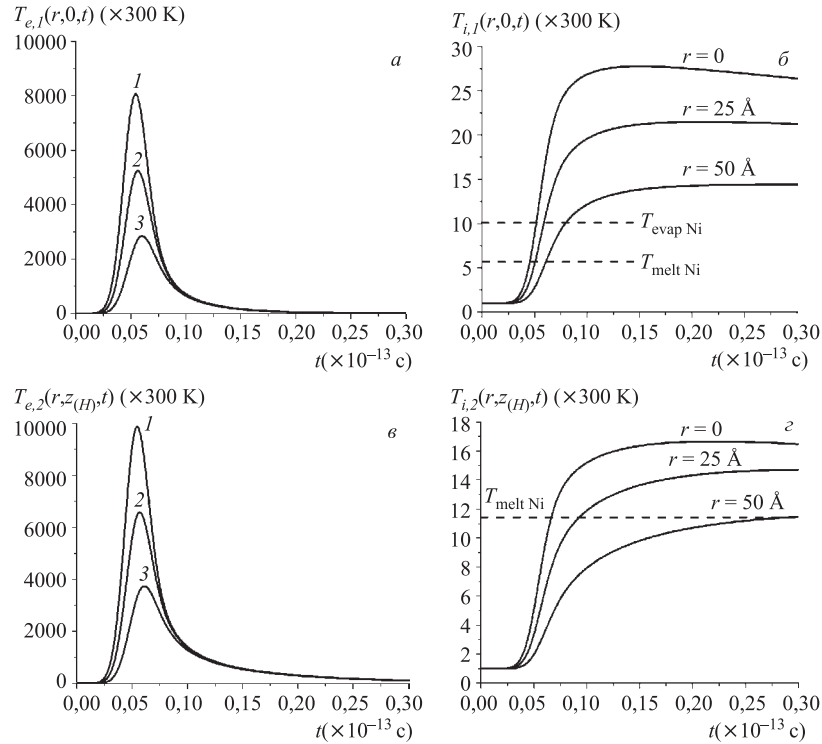


Рис. 3. Зависимости от времени температуры электронного газа (*a*) и решетки (*b*) на поверхности образца первого слоя никеля и второго слоя вольфрама (*c*) на различных расстояниях от траектории ( $z_{(H)} = 2 \cdot 10^4 \text{ \AA}$ )

Видно, что при всех выбранных значениях радиуса  $r$  температура решетки никеля и температура решетки вольфрама при определенных временах может превышать температуру плавления как  $T_{\text{melt},N}$  никеля, так и  $T_{\text{melt},W}$  вольфрама.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе на основе модели термического пика получены результаты численного исследования температур электронного газа и кристаллической решетки в двуслойных материалах. Выполнен численный анализ точности явной схемы вычислений. По результатам вычислительных экспериментов можно сделать следующие выводы:

1. В случае облучения двуслойного материала Ni(2 мкм)/W ионами висмута с энергией 710 МэВ могут происходить фазовые переходы: плавление в обоих слоях, а испарение только в первом слое.

2. На основе полученных результатов можно выделить характерные размеры областей с фазовыми переходами. Поверхность уровня температуры, равной температуре плавления, которая имеет вид цилиндрического параболоида, достигает максимального размера  $D_{\text{max}}^{\text{melt}}|_{z=0} \simeq 222 \text{ \AA}$ ,  $D_{\text{max}}^{\text{melt}}|_{z=2 \cdot 10^4 \text{ \AA}} \simeq 219 \text{ \AA}$ ,  $Z_{\text{max}}^{\text{melt}}|_{r=0} \simeq 7,2 \cdot 10^4 \text{ \AA}$ . Процессы плавления, затвердевания и испарения происходят внутри этой области. Аналогичная поверхность для температуры испарения имеет размеры  $D_{\text{max}}^{\text{evap}}|_{z=0} \simeq 149 \text{ \AA}$ ,  $D_{\text{max}}^{\text{evap}}|_{z=2 \cdot 10^4 \text{ \AA}} \simeq 147 \text{ \AA}$ .

3. При решении системы уравнений (11)–(12) по мере уменьшения температуры в электронной системе и увеличения температуры решетки слагаемое  $g(T_{e,1} - T_{i,1})$  меняет знак (например,  $T_{e,1} = T_{i,1}$  для точки  $r = 0$ ,  $z = 0$  при  $t = 0,245 \cdot 10^{-13}$  с и  $T_{e,2} = T_{i,2}$  для точки  $r = 0$ ,  $z = 2 \cdot 10^4 \text{ \AA}$  при  $t = 0,546 \cdot 10^{-13}$  с), т. е. происходит нагревание остывшей электронной подсистемы за счет решетки.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, гранты № 05-01-00645-а и № 03-01-00657.

## ЛИТЕРАТУРА

1. Leguay R. et al. // Nucl. Instr. Meth. B. 1995. V. 106. P.28–33.
2. Bolse W., Schattat B. // Nucl. Instr. Meth. B. 2002. V. 190. P.173–176.
3. Bolse W. // Surf. and Coating Techn. 2002. V. 158–159. P.1–7.
4. Wang Z. G. et al. // J. Phys.: Condens. Matter. 1994. V. 6, No. 534. P.6733–6750.

5. *Dufour C. et al.* // J. Phys.: Condens. Matter. 1993. V. 5, No. 26. P. 4573–4584.
6. *Audouard A. et al.* // J. Phys: Condens. Matter. 1993. V. 5, No. 5. P. 995–1018.
7. *Fleisher R. L., Price P. B., Walker R. M.* // J. Appl. Phys. 1965. V. 36, No. 11. P. 3645–3652.
8. *Fleisher R. L., Price P. B., Walker R. M.* Nuclear Track in Solids. Los Angeles: University of California. 1975.
9. *Баранов И. А. и др.* // УФН. 1988. Т. 156, № 3. С. 477–510.
10. *Баранов И. А., Кривоухатский А. С., Обнорский В. В.* // ЖТФ. 1981. Т. 51, № 12. С. 2457–2475.
11. *Baranov I. et al.* // Nucl. Instr. Meth. B. 2002. V. 193. P. 798–803.
12. *Baranov I. et al.* // Ibid. P. 809–815.
13. *Yavlinskii Yu.* // Nucl. Instr. Meth. B. 1998. V. 146, No. 1–4. P. 142–146.
14. *Seitz F., Koehler J. S.* // Sol. St. Phys., 1956. V. 2. P. 251.
15. *Vineyard G. H.* Thermal spikes and activated processes // Radiat. Eff. 1976. V. 29, No. 4. P. 245–248.
16. *Лифшиц И. М., Каганов М. И., Танатаров Л. В.* К теории релаксационных изменений в металлах // АЭ. 1959. Т. 6. С. 391–402.
17. *Каганов М. И., Лифшиц И. М., Танатаров Л. В.* Релаксация между лектронами и решеткой // ЖЭТФ. 1956. Т. 31, № 2(8). С. 232–237.
18. *Лифшиц И. М.* О температурных вспышках в среде, подверженной действию ядерного излучения // ДАН СССР. 1956. Т. 109, № 6. С. 1109–1111.
19. *Гегузин Я. Е., Каганов М. И., Лифшиц И. М.* Влияние длины свободного пробега электронов на образование трека траектории заряженной частицы в металле // ФТТ. 1973. Т. 15, № 8. С. 2425–2428.
20. *Давыдов А. А., Калининко А. И.* Механические эффекты вблизи ионных треков и термических пиков // Вопросы атомной науки и техники. Сер.: Физика радиационных повреждений и радиационное материаловедение. 1985. Вып. 3(36). С. 27–30.
21. *Дидык А. Ю., Робук В. Н., Семина В. К.* Температура в треке тяжелого иона с высокими удельными ионизационными потерями энергии в модели термического пика в материалах. Препринт ОИЯИ Р17-2003-30. Дубна, 2003. 34 с.
22. *Амирханов И. В. и др.* Численный расчет температурных эффектов в материалах при облучении их тяжелыми ионами высоких энергий в рамках уравнений теплопроводности для электронов и решетки. Препринт ОИЯИ Р11-2004-165, Дубна, 2004.

23. *Waligorski M.R.P., Hamm R.N., Katz R.* The radial distribution of dose around the path of a heavy ion in liquid water // *Nucl. Tracks and Radiat. Meas.* 1986. V. 11. P. 306–319.
24. *Dufour C., Paumier E., Toulemonde M.* // *Radiat. Eff. and Defects in Solids.* 1993. V. 126. P. 119.
25. *Bitensky I.S., Dimirev P., Sundqvist B.U.R.* On model of fullerene formation from polymer under MeV ion impact // *Nucl. Instr. Meth. B.* 1998. V. 82. P. 356–361.
26. *Лыков А.В.* Теплообмен. М.: Энергия, 1972. С. 561; М.: Наука, 1977. 755 с.
27. *Карслоу Г., Езер Д.* Теплопроводность твердых тел. М.: Наука, 1964. С. 488.
28. *Амирханов И.В. и др.* Численное моделирование фазовых переходов в металлах, облучаемых импульсными пучками ионов. Сообщение ОИЯИ Р11-2001-164. Дубна, 2001. С. 1–15.
29. *Amirkhanov I.V. et al.* Influence of the source form in the model of phase moves in metals exposed to pulsed ion beams // *Journal of Computational Methods in Sciences and Engineering.* 2004. V. 2, No. 3. P. 1–3.
30. *Амирханов И.В. и др.* Численное моделирование испарения металлов под действием импульсных ионных пучков. Препринт ОИЯИ Р11-2003-110. Дубна, 2003. С. 1–21.
31. *Amirkhanov I.V. et al.* Numerical Simulation of Evaporation of Metals under the Action of Pulsed Ion Beams // *Crystallography Reports.* 2004. V. 49, Suppl. 1. P. S123–S128.
32. *Behrisch R.* Evaporation for heat pulses on Ni, Mo, W and ATJ graphite as first wall materials // *J. Nucl. Mater.* 1980. V. 93-94. P. 498–504.
33. *Hultgren R. et al.* Selected values of thermodynamic properties of metals and alloys. Willey, 1972.
34. *Zigmund P., Claussen C.* Sputtering from elastic-collision spikes in heavy-ion-bombarded metals // *J. Appl. Phys.* 1980. V. 52(2). P. 990–993.
35. *Jakas M.* Fluid dynamics calculation of sputtering // *Nucl. Instr. Meth. B.* 2002. V. 193. P. 723–733.
36. *Berthelot A. et al.* Irradiation of tin oxide nanometric powder with swift heavy ions // *Nucl. Instr. Meth. B.* 2000. V. 166–167. P. 927–932.
37. *Methfessel M., Hennig D., Scheffer M.* Trends of the surface relaxation, surface energies, and work functions of 4d transition metals // *Phys. Rev. B.* 1990. V. 46, № 8. P. 4816–4829.

38. Глушцов А. И. и др. Локальные тепловые процессы при торможении быстрых заряженных частиц в полупроводниковых кристаллах // Докл. АН БССР. 1987. Т. 31, № 7. С. 609–611.
39. Weymann H. D. Finite speed of propagation in heat conduction, diffusion, and viscous shear motion // Amer. J. Phys. 1967. V. 35, № 6. P. 488–496.
40. Новиков А. П. и др. Локальные тепловые и акустические процессы при торможении быстрых заряженных частиц в кристаллах // Вестник БГУ, сер. 1. 1992. № 1. С. 10–13.
41. Физические величины. Справочник. Под ред. И. С. Григорьева, Е. З. Мейлиховой. М.: Энергоатомиздат, 1991. 1232 с.
42. Самарский А. А., Гулин А. В. Устойчивость разностных схем. М.: Наука, 1973. 415 с.

Получено 10 июня 2005 г.



Редактор *М. И. Зарубина*

Подписано в печать 10.09.2005.

Формат 60 × 90/16. Бумага офсетная. Печать офсетная.

Усл. печ. л. 1,68. Уч.-изд. л. 2,12. Тираж 310 экз. Заказ № 54311.

Издательский отдел Объединенного института ядерных исследований  
141980, г. Дубна, Московская обл., ул. Жолио-Кюри, 6.

E-mail: [publish@pds.jinr.ru](mailto:publish@pds.jinr.ru)

[www.jinr.ru/publish/](http://www.jinr.ru/publish/)