

P11-2005-147

И. В. Амирханов, А. Ю. Дидык, Д. З. Музафаров,
И. В. Пузынин, Т. П. Пузынина, Н. Р. Саркар,
И. Сархадов, З. А. Шарипов

**ИССЛЕДОВАНИЕ ТЕПЛОВЫХ ПРОЦЕССОВ
В МАТЕРИАЛАХ ПРИ ОБЛУЧЕНИИ
ИХ ТЯЖЕЛЫМИ ИОНАМИ ВЫСОКИХ
ЭНЕРГИЙ В РАМКАХ ОБЩЕЙ МОДЕЛИ
ТЕРМИЧЕСКОГО ПИКА**

Направлено в оргкомитет V Национальной конференции
по применению рентгеновского, синхротронного излучений,
нейтронов и электронов для исследования наноматериалов
и наносистем (РСНЭ НАНО – 2005), Москва,
14–19 ноября 2005 г.

Амирханов И. В. и др.	P11-2005-147
Исследование тепловых процессов в материалах при облучении их тяжелыми ионами высоких энергий в рамках общей модели термического пика	
<p>Система уравнений для температуры электронного газа и решетки вокруг и вдоль траектории тяжелого иона урана с энергией 700 МэВ в никеле при значениях теплоемкости и теплопроводности, зависящих от температуры с соответствующими начальными и граничными условиями, решена численно в аксиально-симметричной цилиндрической системе координат. На основе полученных зависимостей температуры решетки от радиуса вокруг траектории иона и глубины можно сделать вывод, что ионизационные потери энергии иона урана в никеле достаточны для плавления материала. Сделан сравнительный анализ с линейной моделью и оценен размер области в мишени с максимальным радиусом и глубиной, где могут происходить процессы плавления материала мишени.</p> <p>Работа выполнена в Лаборатории информационных технологий ОИЯИ.</p>	
Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна, 2005	

Amirkhanov I. V. et al.	P11-2005-147
Investigation of Thermal Processes in Materials on Irradiation with Heavy Ions of High Energies in the Framework of a General Model of Thermal Peak	
<p>A system of equations for temperatures of electronic gas and lattice around and along the trajectory of a 700-MeV heavy ion of uranium in nickel at the values of thermal parameters, depending on temperature with corresponding initial and boundary conditions, is solved numerically in an axially symmetric cylindrical system of coordinates. On the basis of the obtained lattice temperature dependences on radius around the ion trajectory and depth, it is possible to make a conclusion that the ionization energy losses of uranium ion in nickel are sufficient for melting a material. A comparative analysis with the linear model is given, and the size of the region with maximum radius and depth in the target material, where the melting process can take place, is estimated.</p> <p>The investigation has been performed at the Laboratory of Information Technologies, JINR.</p>	
Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna, 2005	

ВВЕДЕНИЕ

Исследования воздействия высокоионизирующих заряженных частиц на материалы [1–3] становятся актуальными в связи с созданием ускорителей и накопительных колец тяжелых ионов высоких энергий, а также с проблемой определения радиационной стойкости конструкционных материалов, которые предполагается использовать, помимо прочего, в термоядерных реакторах. К таким исследованиям относится, в частности, изучение особенностей радиационного распыления и изменения механических свойств материалов при облучении их тяжелыми ионами высоких энергий. Как показали эксперименты по изучению особенностей накопления тяжелых ионов в накопительных кольцах [4], проведенные на ускорителе тяжелых ионов LINAC3 в ЦЕРН, явление распыления материала стенок необходимо учитывать. В частности, конструкционная нержавеющая сталь, предварительно облученная для поверхностной очистки ионами $\text{Ag}(90\%)\text{-O}_2(10\%)$ и затем отоженная при высоком вакууме и температуре $350\text{ }^\circ\text{C}$ в течение длительного времени (до 24 ч), была облучена ионами $^{207}\text{Pb}^{27+}$ и $^{207}\text{Pb}^{53+}$ с энергией 4,2 МэВ/а.е.м. Было обнаружено, что из подготовленной таким образом стали происходит десорбция (выделение) газовых ионов H_2 , CH_4 , CO , CO_2 в количестве до $2 \cdot 10^4$ молекул/ион [4]. Это приводит к резкому ухудшению вакуума в месте попадания иона ^{207}Pb в стенку накопительного кольца-ионопровода. Последующее рассеяние накапливаемых ионов на выделившихся газовых молекулах и атомах вызывает значительное уменьшение тока ионного пучка или его полное пропадание из-за ионов, отклонившихся от равновесной траектории в накопительном кольце и также попавших в стенку ионопровода и вызвавших аналогичный процесс десорбции. Отдельный интерес представляет проблема изучения особенностей образования треков в материалах с различной электронной проводимостью. Существующие модели образования треков тяжелых ионов основаны на двух альтернативных подходах: модели термического пика (клина) и кулоновского взрыва [5, 6]. Отметим, что треком тяжелой заряженной частицы принято называть сильно деструктурированную область вокруг траектории тяжелой частицы в материале, созданную за счет температурных эффектов, вызванных ионизационными потерями энергии тяжелой заряженной частицы и приводящих к расплавлению и последующей частичной (или полной) рекристаллизации этой области.

Исследованиям взаимодействия тяжелых заряженных ионов с различными образцами посвящено значительное количество экспериментальных работ [7–15]. Модель термического пика была эффективно использована для объяснения процессов неупругого распыления мелкодисперсных материалов [2, 3, 16, 17].

Отметим, что интерес к изучению процессов при прохождении тяжелых ионов через материалы обусловлен особенностями радиационных изменений в материалах, что не только имеет большое значение для понимания основных закономерностей этих процессов, но и важно для использования радиационных эффектов в развитии новых технологий в материаловедении.

Аналогичный интерес представляют эксперименты по изучению воздействия мощных лазерных импульсов малой длительности [17, 18] (вплоть до предельно коротких импульсов лазера, порядка 10^{-12} с) на структуру металлов и теоретические работы, посвященные объяснению наблюдаемых эффектов (см. [19]).

В работе [20] было использовано уравнение теплопроводности для вычисления температуры аморфных металлов при облучении их тяжелыми ионами. В работах [14, 15, 21, 22] уравнение теплопроводности было также использовано для оценок температуры решетки.

В основополагающих работах [23–27] для вычисления температур решетки и электронов была введена система двух связанных уравнений теплопроводности. Данная система уравнений решалась приближенными, оценочными методами [24–27] при не зависящих от температуры константах, таких как теплоемкость и теплопроводность. При выполненных оценках температур электронного газа и решетки не учитывалась зависимость удельных ионизационных потерь энергии от глубины в мишени. Естественно, что для описания эффектов, связанных с высокими коэффициентами распыления в модели испарения, необходимо ввести и зависимость от глубины в мишени, как, например, было сделано в работах [28, 29], в которых были рассмотрены проблемы фазовых переходов, таких как твердое тело – жидкость и твердое тело – парообразное состояние, под действием мощных импульсных пучков тяжелых ионов малой энергии при малом пробеге ионов.

Распыление в механизме испарения имеет место в диэлектриках и материалах с высокой концентрацией протяженных дефектных структур, таких как дислокации, поры, межузловые и дислокационные петли, а также при высокой концентрации точечных дефектов (френкелевских пар) [30–32].

Учет влияния температуры решетки на параметры решетки, такие как удельная теплоемкость и теплопроводность, при решении связанных уравнений теплопроводности в цилиндрической геометрии с отсутствием зависимости от глубины трека был выполнен в целом ряде работ (см., например, [7–9, 11, 33–36]). Целью настоящей работы является исследование тепловых процессов при облучении никеля ионами урана с энергией 700 МэВ в

рамках модели термического пика с учетом зависимости теплофизических параметров от температуры.

1. СИСТЕМА УРАВНЕНИЙ МОДЕЛИ ТЕРМИЧЕСКОГО ПИКА

Система связанных уравнений в частных производных в цилиндрической системе координат записывается с учетом зависимости удельной теплоемкости и теплопроводности от температуры и имеет вид

$$C_e(T_e) \frac{\partial T_e}{\partial t} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \lambda_e(T_e) \frac{\partial T_e}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\lambda_e(T_e) \frac{\partial T_e}{\partial z} \right) - g(T_e)(T_e - T_i) + A(r, z, t), \quad (1)$$

$$C_i(T_i) \frac{\partial T_i}{\partial t} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \lambda_i^{\parallel}(T_i) \frac{\partial T_i}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\lambda_i^{\perp}(T_i) \frac{\partial T_i}{\partial z} \right) + g(T_e)(T_e - T_i). \quad (2)$$

Ось z направлена перпендикулярно облучаемой поверхности мишени, т.е. по направлению движения тяжелого иона. Производная по углу отсутствует ввиду цилиндрической симметрии удельных ионизационных потерь тяжелого иона. Здесь $T_e(r, z, t)$ и $T_i(r, z, t)$ — температуры электронов и решетки, $C_e(T_e)$, $C_i(T_i)$ и $\lambda_e(T_e)$, $\lambda_i^{\parallel, \perp}(T_i)$ — соответственно удельные теплоемкости и теплопроводности электронов и решетки, зависящие от температуры. Символы « \parallel » и « \perp » означают, что теплопроводность для монокристаллов иногда зависит от направления, и они соответствуют направлениям вдоль и перпендикулярно к поверхности. g — коэффициент, характеризующий взаимодействия электронной подсистемы с решеткой (в общем случае зависящий от температуры электронного газа). Функция $A(r, z, t)$ — объемная плотность вносимой ионом мощности. Она может быть представлена в виде наиболее часто используемого выражения [33–35, 37]

$$A(r, z, t) = b S_{\text{inel}0} \exp \left(- \frac{(t - t_0)^2}{2\sigma_t^2} \right) \exp \left(- \frac{r}{r_0} \right) \mu(z). \quad (3)$$

Здесь функция $\mu(z)$ — профиль ионизационных потерь иона $S_{\text{inel}}(Z)$, нормированный на значение ионизационных потерь энергии E на входе в мишень $S_{\text{inel}0}$:

$$\mu(z) = \frac{S_{\text{inel}}(z)}{S_{\text{inel}0}}, \quad S_{\text{inel}0} = S_{\text{inel}}(z = 0), \quad S_{\text{inel}} = - \left(\frac{\partial E}{\partial z} \right)_{\text{inel}}. \quad (4)$$

Время достижения электронами равновесного распределения (т.е. время свободного пробега δ -электронов со средней энергией ε_e) $t_0 \simeq (1-5) \cdot 10^{-15}$ с,

полуширина распределения по времени t принята равной $\sigma_t = t_0$ [34]. Скорость экспоненциального спада [35] или пространственная ширина высоко-возбужденной области [36] $r_0 \leq 2,5$ нм (согласно данным работы [35]) и $r_0 \simeq 1$ нм (см. [20]).

Нормирующий множитель b определяется из условия нормировки

$$\int_0^{\infty} dt \int_0^{r_m} 2\pi r A(r, z, t) dr = S_{\text{inel}} = S_{\text{inel}0} \mu(z); \quad (5)$$

здесь r_m — максимальный пробег δ -электронов, зависящий от максимальной энергии ε_m , передаваемой отдельному электрону [20, 36].

Начальные условия записываются в следующем виде (см., например, [4, 6]):

$$T_{e,i}(r, z, 0) = T_0 = 300 \text{ K}, \quad (6)$$

а граничные условия — в виде

$$\left. \frac{\partial T_{e,i}(r, z, t)}{\partial r} \right|_{r=0} = 0, \quad \left. \frac{\partial T_{e,i}(r, z, t)}{\partial z} \right|_{z=0} = 0, \quad (7)$$

$$T_{e,i}(R_{\text{max}}, z, t) = T_{e,i}(r, Z_{\text{max}}, t) = T_0. \quad (8)$$

Здесь и далее R_{max} — радиус удаления от траектории иона, а Z_{max} — глубина, превышающая длину проективного пробега иона, при которых решетку можно считать невозмущенной, а ее температуру при $r > R_{\text{max}}$ и $z > Z_{\text{max}}$ равной T_0 . Тем самым начальные и граничные условия означают, что в начальный момент времени электронная и ионная подсистемы имеют температуру, равную комнатной, а граница $z = 0$ теплоизолирована. Кроме того, температуры электронного газа и решетки на большом расстоянии от траектории иона также равны комнатной температуре.

При решении системы уравнений (1), (2) целесообразно ввести безразмерные переменные, а именно: $\tilde{T}_e = T_e/T_0$, $\tilde{T}_i = T_i/T_0$, $\tilde{r} = r/\Delta r$, $\tilde{z} = z/\Delta z$, $\tilde{t} = t/\Delta t$, где Δr , Δz и Δt — единицы измерения расстояния и времени. Эти единицы выбраны в виде $\Delta t = \alpha_1 t_0$ и $\Delta r = \Delta z = \alpha_2 r_0$. Здесь α_1, α_2 — произвольные безразмерные константы. Значения этих констант положим равными: $\alpha_1 = \alpha_2 = 100$. Тогда систему уравнений (1), (2) в случае, если в кристалле нет анизотропии (т.е. $\lambda_i^{\parallel} = \lambda_i^{\perp} = \lambda_i$), можно записать в виде (верхние значки над безразмерными величинами опущены)

$$\begin{aligned} \frac{\partial T_e}{\partial t} = & \frac{B_1}{C_e(T_e)} \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \lambda_e(T_e) \frac{\partial T_e}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\lambda_e(T_e) \frac{\partial T_e}{\partial z} \right) \right] - \\ & - \frac{B_3 g(T_e)}{C_e(T_e)} (T_e - T_i) + \frac{A(r, z, t)}{C_e(T_e)}, \quad (9) \end{aligned}$$

$$\frac{\partial T_i}{\partial t} = \frac{B_2}{C_i(T_i)} \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \lambda_i(T_i) \frac{\partial T_i}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\lambda_i(T_i) \frac{\partial T_i}{\partial z} \right) \right] + \frac{B_4 g(T_e)}{C_i(T_i)} (T_e - T_i), \quad (10)$$

где

$$B_1 = \frac{\lambda_e(T_0) \alpha_1 t_0}{C_e(T_0) \cdot (\alpha_2 r_0)^2}, \quad B_2 = \frac{\lambda_i(T_0) \alpha_1 t_0}{C_i(T_0) \cdot (\alpha_2 r_0)^2},$$

$$B_3 = \frac{g(T_0) \alpha_1 t_0}{C_e(T_0)}, \quad B_4 = \frac{g(T_0) \alpha_1 t_0}{C_i(T_0)}.$$

Начальные и граничные условия (6)–(8) тогда записываются в виде

$$T_\beta(t, z, 0) = 1; \quad \left. \frac{\partial T_\beta}{\partial r} \right|_{r=0} = 0; \quad \left. \frac{\partial T_\beta}{\partial z} \right|_{z=0} = 0; \quad (11)$$

$$T_\beta(R_{\max}, z, t) = 1; \quad T_\beta(r, Z_{\max}, t) = 1, \quad (12)$$

где $\beta = e, i$.

Безразмерная объемная плотность мощности $A(r, z, t)$ в уравнении (9) определяется формулой

$$A(r, z, t) = A_0 \exp(-\alpha_2 r) \exp \left[-\frac{\alpha_1}{2} (t - 0,05)^2 \right] \mu(z), \quad (13)$$

здесь $A_0 = b S_{\text{in}e10} \alpha_1 t_0 / (C_e(T_0) T_0)$.

Отметим, что в записи выражения $A(r, z, t)$ в виде (13) по сравнению с выражением, приведенным в (3), имеется различие. Зависящий от времени множитель в выражении (3) представляется как $\exp[-(t - t_0)^2 / (2t_0^2)]$, а в выражении (13) — $\exp[-(t - 5t_0)^2 / (2t_0^2)]$. Как ясно из формулировки задачи, функция источника $A(r, z, t)$ при $t = 0$ должна быть тоже равна нулю, поэтому введение коэффициента 5 перед t_0 позволяет значительно уменьшить значение этого временного множителя, а именно в e^{12} раз, что и позволяет сделать ситуацию с временной зависимостью более реалистичной.

При комнатной температуре $T = 300$ К теплофизические параметры никеля следующие:

$$C_e(T_0) = 2,733 \cdot 10^{-2} \frac{\text{Дж}}{\text{см}^3 \cdot \text{К}}, \quad C_i(T_0) = 3,91 \frac{\text{Дж}}{\text{см}^3 \cdot \text{К}},$$

$$g(T_0) = 4,05 \cdot 10^{12} \frac{\text{Вт}}{\text{см}^3 \cdot \text{К}}, \quad \lambda_e(T_0) = 4,1 \frac{\text{Вт}}{\text{см} \cdot \text{К}},$$

$$\lambda_i(T_0) = 0,91 \frac{\text{Вт}}{\text{см} \cdot \text{К}}, \quad S_e(0) = 1,157 \cdot 10^{-7} \frac{\text{Дж}}{\text{см}}.$$

Нелинейные параметры модели $C_e(T_e)$, $C_i(T_i)$, $g(T_e)$, $\lambda_e(T_e)$, $\lambda_i(T_i)$, нормированные на их значения при комнатной температуре $T = 300$ К, имеют следующий вид:

$$\begin{aligned}
C_e(T_e) &= \begin{cases} T_e & \text{при } T_e < T_F, \\ 128,16 & \text{при } T_e > T_F, \end{cases} \\
\lambda_e(T_e) &= \begin{cases} \frac{0,973}{T_e} + 0,026 \cdot T_e & \text{при } T_e < T_F, \\ 3,53 \cdot 10^{-4} \cdot T_e^{3/2} & \text{при } T_e > T_F, \end{cases} \\
C_i(T_i) &= \begin{cases} 0,876 + 0,128T_i - 0,667T_i^2 & \text{при } T_e < T_{\text{melt}}, \\ 1,393 & \text{при } T_e > T_{\text{melt}}, \end{cases} \\
\lambda_i(T_i) &= \begin{cases} 3,079 - 3,53T_i + 1,793T_i^2 - 0,3667T_i^3 + 0,0264T_i^4 & \text{при } T_e < T_{\text{melt}}, \\ 0,4528 & \text{при } T_e > T_{\text{melt}}, \end{cases} \\
g(T_e) &= \frac{1}{\lambda_e(T_e)},
\end{aligned}$$

где $T_F = 454,3$ — безразмерная температура Ферми, $T_{\text{melt}} = 5,75$ — безразмерная температура плавления никеля.

При численном решении системы нелинейные параметры в точках разрыва сглаживаем гиперболическим тангенсом. Система уравнений (9), (10) при $r = 0$ имеет особенность, поэтому для составления численных схем, вычисляя производные по r , уравнение (9), (10) перепишем в следующем виде [39]:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial T_e}{\partial t} &= \frac{B_1}{C_e(T_e)} \left[\frac{\lambda_e(T_e)}{r} \frac{\partial T_e}{\partial r} + \frac{\partial}{\partial r} \left(\lambda_e(T_e) \frac{\partial T_e}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\lambda_e(T_e) \frac{\partial T_e}{\partial z} \right) \right] - \\
&\quad - \frac{B_3 g(T_e)}{C_e(T_e)} (T_e - T_i) + \frac{A(r, z, t)}{C_e(T_e)}, \quad (9')
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial T_i}{\partial t} &= \frac{B_2}{C_i(T_i)} \left[\frac{\lambda_i(T_i)}{r} \frac{\partial T_i}{\partial r} + \frac{\partial}{\partial r} \left(\lambda_i(T_i) \frac{\partial T_i}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\lambda_i(T_i) \frac{\partial T_i}{\partial z} \right) \right] + \\
&\quad + \frac{B_4 g(T_e)}{C_i(T_i)} (T_e - T_i). \quad (10')
\end{aligned}$$

Для приведенных величин безразмерные коэффициенты B_1 , B_2 , B_3 , B_4 , A_0 , R_{max} , Z_{max} принимают значения $B_1 \simeq 0,15$; $B_2 \simeq 2,33 \cdot 10^{-4}$; $B_3 \simeq 14,82$; $B_4 \simeq 0,1036$; $A_0 \simeq 8,97 \cdot 10^6$; $R_{\text{max}} = 0,5$; $Z_{\text{max}} = 200$.

Таким образом, для численного решения нелинейной системы уравнений (9'), (10') с начальными и граничными условиями (11), (12) все параметры известны. Зависимость нормированных на максимальное значение удельных ионизационных потерь энергии $\mu(z)$ ионов урана от глубины в мишени никеля

(см. выражения (3), (4)) приведена на рис. 1. Расчет выполнен по наиболее часто используемой компьютерной программе SRIM-2000.

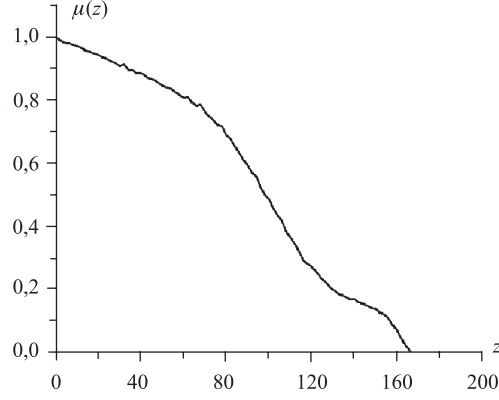


Рис. 1. Зависимость нормированных на максимальное значение ($S_{\text{inel}0}$) удельных ионизационных потерь энергии $\mu(z)$ ионов урана в никеле от безразмерной глубины пробега

2. МЕТОД ЧИСЛЕННОГО РЕШЕНИЯ

Введем равномерную сетку по переменным в уравнениях (9'), (10'), т. е. положим $\{r_i = ih_r (i = 0, 1, \dots, m), z_j = jh_z (j = 0, 1, \dots, n), t_k = kh_t (k = 0, 1, \dots, l)\}$; h_r , h_z и h_t — соответственно шаги по переменным r , z и t . Во избежание путаницы индексов температуры электронной подсистемы и решетки обозначим через \bar{T} и T соответственно. Тогда значения функций \bar{T} и T в узлах обозначим символами $\bar{T}_{i,j}^k$ и $T_{i,j}^k$.

Для решения системы уравнений (9'), (10'), (11)–(13) будем использовать следующую консервативную двухслойную явную конечно-разностную схему порядка аппроксимации $O(h_t + h_r^2 + h_z^2)$ [38–40]:

$$\begin{aligned} \frac{\bar{T}_{i,j}^{k+1} - \bar{T}_{i,j}^k}{h_t} = & \frac{B_1}{C_e(\bar{T}_{i,j}^k)} \left[\frac{\lambda_e(\bar{T}_{i,j}^k)}{i \cdot h_r} \cdot \frac{\bar{T}_{i+1,j}^k - \bar{T}_{i-1,j}^k}{2 \cdot h_r} + \right. \\ & \left. + \frac{1}{h_r} \left(\frac{\lambda_e(\bar{T}_{i+1,j}^k) + \lambda_e \bar{T}_{i,j}^k}{2} \cdot \frac{\bar{T}_{i+1,j}^k - \bar{T}_{i,j}^k}{h_r} - \frac{\lambda_e(\bar{T}_{i,j}^k) + \lambda_e(\bar{T}_{i-1,j}^k)}{2} \right) \times \right. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \times \frac{\bar{T}_{i,j}^k - \bar{T}_{i-1,j}^k}{h_r} \Big) + \frac{1}{h_z} \left(\frac{\lambda_e(\bar{T}_{i,j+1}^k) + \lambda_e \bar{T}_{i,j}^k}{2} \cdot \frac{\bar{T}_{i,j+1}^k - \bar{T}_{i,j}^k}{h_z} - \right. \\ & \left. - \frac{\lambda_e(\bar{T}_{i,j}^k) + \lambda_e(\bar{T}_{i,j-1}^k)}{2} \cdot \frac{\bar{T}_{i,j}^k - \bar{T}_{i,j-1}^k}{h_z} \right) \Big] - \frac{B_3 \cdot g(\bar{T}_{i,j}^k)}{C_e(\bar{T}_{i,j}^k)} \cdot (\bar{T}_{i,j}^k - \bar{T}_{i,j}^k) + \frac{A_{i,j}^k}{C_e(\bar{T}_{i,j}^k)}, \end{aligned} \quad (14)$$

$$\begin{aligned} \frac{T_{i,j}^{k+1} - T_{i,j}^k}{h_t} &= \frac{B_2}{C_i(T_{i,j}^k)} \left[\frac{\lambda_i(T_{i,j}^k)}{i \cdot h_r} \cdot \frac{T_{i+1,j}^k - T_{i-1,j}^k}{2 \cdot h_r} + \right. \\ &+ \frac{1}{h_r} \left(\frac{\lambda_i(T_{i+1,j}^k) + \lambda_i(T_{i,j}^k)}{2} \cdot \frac{T_{i+1,j}^k - T_{i,j}^k}{h_r} - \frac{\lambda_i(T_{i,j}^k) + \lambda_i(T_{i-1,j}^k)}{2} \times \right. \\ &\times \frac{T_{i,j}^k - T_{i-1,j}^k}{h_r} \Big) + \frac{1}{h_z} \left(\frac{\lambda_i(T_{i,j+1}^k) + \lambda_i(T_{i,j}^k)}{2} \cdot \frac{T_{i,j+1}^k - T_{i,j}^k}{h_z} - \right. \\ &\left. \left. - \frac{\lambda_i(T_{i,j}^k) + \lambda_i(T_{i,j-1}^k)}{2} \cdot \frac{T_{i,j}^k - T_{i,j-1}^k}{h_z} \right) \right] + \frac{B_4 \cdot g(\bar{T}_{i,j}^k)}{C_i(T_{i,j}^k)} \cdot (\bar{T}_{i,j}^k - T_{i,j}^k), \end{aligned} \quad (15)$$

$$\begin{aligned} \bar{T}_{i,j}^0 &= T_{i,j}^0 = 1, \quad \bar{T}_{m,j}^{k+1} = T_{m,j}^{k+1} = 1, \quad \bar{T}_{i,n}^{k+1} = T_{i,n}^{k+1} = 1, \\ \frac{4\bar{T}_{1,j}^{k+1} - \bar{T}_{2,j}^{k+1} - 3\bar{T}_{0,j}^{k+1}}{2h_r} &= 0, \quad \frac{4\bar{T}_{i,1}^{k+1} - \bar{T}_{i,2}^{k+1} - 3\bar{T}_{i,0}^{k+1}}{2h_z} = 0, \\ \frac{4T_{1,j}^{k+1} - T_{2,j}^{k+1} - 3T_{0,j}^{k+1}}{2h_r} &= 0, \quad \frac{4T_{i,1}^{k+1} - T_{i,2}^{k+1} - 3T_{i,0}^{k+1}}{2h_z} = 0, \\ i &= 1, 2, \dots, m-1, \quad j = 1, 2, \dots, n-1, \quad k = 0, 1, 2, \dots, l. \end{aligned} \quad (16)$$

При вычислении по данной схеме шаг по времени h_t выбирается из условия устойчивости схемы [38]

$$\max_{i,j,k} \left(\frac{\lambda_e(\bar{T}_{i,j}^k)}{C_e(\bar{T}_{i,j}^k)}, \frac{\lambda_i(T_{i,j}^k)}{C_i(T_{i,j}^k)} \right) h_t \left(\frac{1}{h_r^2} + \frac{1}{h_z^2} \right) \leq \frac{1}{2}. \quad (17)$$

Данная схема позволяет на каждом $(k+1)$ -м временном шаге по известным значениям температур электронов и ионов на k -м временном слое находить их значения сначала во всех внутренних точках ($i = 1, 2, \dots, m-1; j = 1, 2, \dots, n-1$), а потом из дискретной записи граничных условий их значения в граничных точках ($i = 0, m; j = 0, n$).

Как уже отмечено, функция $\mu(z)$ вычисляется по программе SRIM-2000 в виде таблицы. При численном моделировании эту функцию предварительно сглаживаем и интерполируем кубическим сплайном.

Для проверки сходимости схемы (14)–(17) проводился численный эксперимент при фиксированных шагах h_r , h_t и на сгущающейся сетке по z , т. е. h_z , $h_z/2$, $h_z/4$ ($h_r = 10^{-3}$, $h_z = 4 \cdot 10^{-2}$, $h_t = 3 \cdot 10^{-6}$). Ниже представлен результат эксперимента в точке $r = 0$, $z = 0$:

$$\begin{aligned} \max_{0 \leq t \leq 100} \left| \frac{T_{h_z}^e(0, 0, t) - T_{h_z/2}^e(0, 0, t)}{(T_{h_z}^e(0, 0, t) + T_{h_z/2}^e(0, 0, t))/2} \right| &\simeq 7,05 \cdot 10^{-4} && \text{при } t \simeq 2,71; \\ \max_{0 \leq t \leq 100} \left| \frac{T_{h_z/2}^e(0, 0, t) - T_{h_z/4}^e(0, 0, t)}{(T_{h_z/2}^e(0, 0, t) + T_{h_z/4}^e(0, 0, t))/2} \right| &\simeq 2,48 \cdot 10^{-4} && \text{при } t \simeq 2,71; \\ \max_{0 \leq t \leq 100} \left| \frac{T_{h_z}^i(0, 0, t) - T_{h_z/2}^i(0, 0, t)}{(T_{h_z}^i(0, 0, t) + T_{h_z/2}^i(0, 0, t))/2} \right| &\simeq 1,64 \cdot 10^{-4} && \text{при } t \simeq 16,79; \\ \max_{0 \leq t \leq 100} \left| \frac{T_{h_z/2}^i(0, 0, t) - T_{h_z/4}^i(0, 0, t)}{(T_{h_z/2}^i(0, 0, t) + T_{h_z/4}^i(0, 0, t))/2} \right| &\simeq 6,09 \cdot 10^{-5} && \text{при } t \simeq 13,7. \end{aligned}$$

Как видно, найденные относительные разности профилей температур на сгущающейся сетке уменьшаются.

3. ОБСУЖДЕНИЕ ПОЛУЧЕННЫХ РЕЗУЛЬТАТОВ

Решая систему уравнений (9), (10) с начальными и граничными условиями (11), (12), мы проанализировали временные и координатные зависимости температур электронного газа T_e и решетки T_i . На рис. 2 для сравнительного анализа из предыдущей работы [41] представлены зависимости от времени температуры электронного газа (рис. 2, *a*) и решетки (рис. 2, *б*) на поверхности образца никеля, облучаемого ионами урана, на различных расстояниях от траектории иона $r = 0; 50; 100; 150 \text{ \AA}$ в рамках линейной двухтемпературной модели термического пика, а на рис. 3 представлены зависимости от времени температуры электронного газа (рис. 3, *a*) и решетки (рис. 3, *б*) на поверхности образца никеля, облучаемого ионами урана на различных расстояниях от траектории иона $r = 0; 50; 100; 150 \text{ \AA}$ в рамках нелинейной двухтемпературной модели термического пика. Из сравнения этих графиков видно, что при учете зависимости теплофизических параметров от температуры температура электронного газа и кристаллической решетки значительно меньше, чем в случае постоянных теплофизических параметров, взятых при комнатной температуре. Особенность нелинейной модели характеризуется тем, что тепловые процессы в кристаллической решетке происходят значительно медленнее, чем в линейном случае. Перечислим некоторые из них.

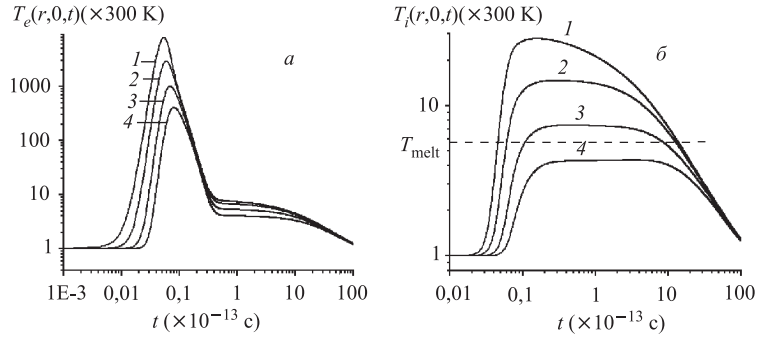


Рис. 2. Зависимости от времени температуры электронного газа (а) и решетки (б) на поверхности $z = 0$ облучаемого ионами урана никеля для различных расстояний от оси трека в рамках линейной модели термопика (штриховой прямой выделена температура плавления T_{melt})

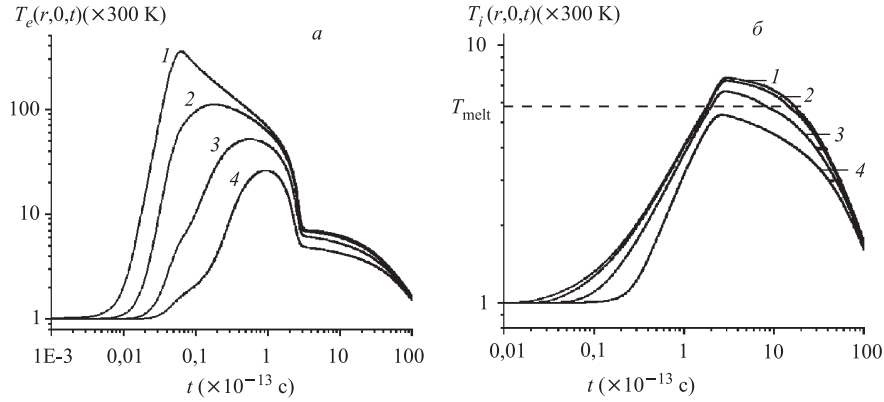


Рис. 3. Зависимости от времени температуры электронного газа (а) и решетки (б) на поверхности $z = 0$ облучаемого ионами урана никеля для различных расстояний от оси трека в рамках нелинейной модели термопика (штриховой прямой выделена температура плавления T_{melt})

1. В линейном случае в точке $r = 0; z = 0$ температура кристаллической решетки через $t = 4,5 \cdot 10^{-15}$ с превышает температуру плавления, а в нелинейном случае этот процесс наступает через $t = 1,8 \cdot 10^{-13}$ с.

2. Выравнивание температур электронного газа и кристаллической решетки в линейной модели наступает через $t = 0,25 \cdot 10^{-13}$ с, а в нелинейной модели через $t = 3,06 \cdot 10^{-13}$ с.

3. Промежуток времени δt , в течение которого в точке $r = 0; z = 0$ температура кристаллической решетки остается больше температуры плавления,

в линейной модели равен $\delta t = 13,45 \cdot 10^{-13}$ с, в нелинейной модели равен $\delta t = 15,4 \cdot 10^{-13}$ с.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе на основе нелинейной двухтемпературной модели термического пика получены результаты численного исследования температур электронного газа и кристаллической решетки. Выполнен численный анализ точности схемы вычислений и сделан сравнительный анализ с линейной двухтемпературной моделью. По результатам вычислительных экспериментов можно сделать следующие выводы.

1. Показано, что в случае облучения никеля ионами урана с энергией 700 МэВ температура мишени превышает температуру плавления, т. е. могут происходить фазовые переходы.

2. При учете зависимости теплофизических параметров от температуры тепловые процессы в кристаллической решетке происходят значительно медленнее, чем при постоянных теплофизических параметрах.

3. Максимальные размеры области, где температура превышает температуру плавления, остаются почти одинаковыми в нелинейной и линейной моделях и равны $D_{\max}^{\text{melt}} \simeq 230 \text{ \AA}$; $Z_{\max}^{\text{melt}} \simeq 140 \cdot 10^3 \text{ \AA}$ (D_{\max}^{melt} — оценка максимального диаметра и Z_{\max}^{melt} — оценка максимальной глубины, где может происходить плавление). Если трек образуется, то его размеры не могут быть больше этих величин. Для уточнения численных результатов необходимо решить систему уравнений (9), (10) с учетом фазовых переходов (задача Стефана).

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

ЛИТЕРАТУРА

1. *Lesueur D.* Amorphisation par irradiation aux flagmats de fission d'un alliage Pd-Si // *Radiat. Effects.* 1975. V. 24, No. 2. P. 101–110.
2. *Баранов И. А., Цепелевич С. О., Явлинский Ю. Н.* Неупругое распыление твердых тел // *УФН.* 1988. Т. 156, № 3. С. 477–510.
3. *Баранов И. А., Кривохатский А. С., Обнорский В. В.* Механизм распыления материалов тяжелыми многозарядными ионами — осколками деления // *ЖТФ.* 1981. Т. 51, № 12. С. 2457–2475.
4. *Chanel M. et al.* Experimental Investigation of Impact-Induced Molecular Desorption by 4.2 MeV/u Pb Ions // *CERN/PS 2001-040 (AE) Materials of Particle Accelerator Conference, 18–22 June 2001, Chicago, USA.*

5. *Fleisher R. L., Price P. B., Walker R. M.* Ion explosion spike mechanism for formation of charged-particle tracks in solids // *J. Appl. Phys.* 1965. V. 36, No. 11. P. 3645–3652.
6. *Fleisher R. L., Price P. B., Walker R. M.* *Nuclear Track in Solids.* Los Angeles: University of California, 1975.
7. *Wang Z. G. et al.* The Se sensitivity of metals under swift-heavy-ion irradiation: a transient thermal process // *J. Phys.: Condens. Matter.* 1994. V. 6, No. 34. P. 6733–6750.
8. *Toulemonde M.* Nanometric phase transformation of oxide materials under GeV energy heavy ion irradiation // *Nucl. Instr. Meth. B.* 1999. V. 156, Nos. 1–4. P. 1–11.
9. *Neumann R.* Scanning probe microscopy of ion-irradiated materials // *Nucl. Instr. Meth. B.* 1999. V. 151, Nos. 1–4. P. 42–55.
10. *Furuno S. et al.* Tracks of high energy heavy ions in solids // *Nucl. Instr. Meth. B.* 1996. V. 107, Nos. 1–4. P. 223–226.
11. *Dufour C. et al.* A high-resistivity phase induced by swift heavy-ion irradiation of Bi: a probe for thermal spike damage // *J. Phys.: Condens. Matter.* 1993. V. 5, No. 26. P. 4573–4584.
12. *Audouard A. et al.* Atomic displacements and atomic motion induced by electron excitation in heavy-ion-irradiated amorphous metallic alloys // *J. Phys: Condens. Matter.* 1993. V. 5, No. 5. P. 995–1018.
13. *Karamian S. A., Oganessian Yu. Ts., Bugrov V. N.* The effect of high-energy ions heavier than argon on a germanium single crystal and a new mechanism for autore-crystallisation // *Nucl. Instr. Meth. B.* 1989. V. 43, No. 2. P. 153–158.
14. *Дидык А. Ю.* Радиационное воздействие тяжелых ионов на хромоникелевую сталь при высоких температурах // *Известия РАН. Металлы.* 1995. № 3. С. 128–135.
15. *Didyk A. Yu., Varichenko V. S.* Track structure in dielectric and semiconductor single crystals irradiated by heavy ions with high level of inelastic energy loss // *Radiat. Meas.* 1995. V. 25, Nos. 1–4. P. 119–124.
16. *Baranov I. et al.* Desorption of nanoclusters (2-40 nm) from nanodispersed metal and semiconductor layers by swift heavy ions // *Nucl. Instr. Meth. B.* 2002. V. 193. P. 798–803.
17. *Baranov I. et al.* Sputtering of nanodispersed targets of gold and desorption of gold nanoclusters (2-100 nm) 6 MeV Au⁵⁺ cluster ions // *Nucl. Instr. Meth. B.* 2002. V. 193. P. 809–815.
18. *Афанасьев Ю. В. и др.* Моделирование абляции металлов ультракороткими лазерными импульсами // *Известия РАН. Серия физическая.* 1999. Т. 63, № 4. С. 667–675.

19. *Анисимов С.И., Ретфельд Б.* К теории взаимодействия сверхкороткого лазерного импульса с металлом // Известия РАН. Серия физическая. 1997. Т. 61, № 8. С. 1642–1655.
20. *Yavlinskii Yu.* Track formation in amorphous metals under swift heavy ion bombardment // Nucl. Instr. Meth. B. 1998. V. 146, Nos. 1–4. P. 142–146.
21. *Seitz F., Koehler J.S.* // Sol. St. Phys. 1956. V. 2. P. 251.
22. *Vineyard G.H.* Thermal spikes and activated processes // Radiat. Eff. 1976. V. 29, No. 4. P. 245–248.
23. *Лифшиц И.М., Каганов М.И., Танатаров Л.В.* К теории релаксационных изменений в металлах // Атомная энергия. 1959. Т. 6. С. 391–402.
24. *Каганов М.И., Лифшиц И.М., Танатаров Л.В.* Релаксация между электронами и решеткой // ЖЭТФ. 1956. Т. 31, № 2(8). С. 232–237.
25. *Лифшиц И.М.* О температурных вспышках в среде, подверженной действию ядерного излучения // ДАН СССР. 1956. Т. 109, № 6. С. 1109–1111.
26. *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.
27. *Давыдов А.А., Калиниченко А.И.* Механические эффекты вблизи ионных треков и термических пиков // Вопросы атомной науки и техники. Сер.: Физика радиационных повреждений и радиационное материаловедение. М., 1985. Вып. 3(36). С. 27–30.
28. *Amirkhanov I. V. et al.* Numerical Simulation of Evaporation of Metals under the Action of Pulsed Ion Beams // Crystallography Reports. Suppl. 1. 2004. V. 49. P. S118–S123.
29. *Амирханов И.В. и др.* Численное моделирование фазовых переходов в металлах, облучаемых импульсными ионными пучками. Сообщение ОИЯИ Р11-2001-164. Дубна, 2001.
30. *Cheblukov Y.N. et al.* The influence of defect structure on the surface sputtering of metals under irradiation of swift heavy ion in the inelastic energy loss region // Nucleonika, 2004. V. 49(1). P. 15–21.
31. *Cheblukov Y.N. et al.* Sputtering of metals by heavy ions in the inelastic energy loss range // Vacuum., 2002. V. 66. P. 133–136.
32. *Чеблукоев Ю.Н. и др.* // Перспективные материалы. 2001. № 5. С. 42–45.
33. *Dufour C. et al.* Modifications induced by irradiation in glasses / Ed.: P. Massoldi. Amsterdam: North-Holland, 1992. P. 61.

34. *Dufour C., Paumier E., Toulemonde M.* // Radiat. Eff. and Defects in Solids. 1993. V. 126. P. 119.
35. *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.
36. *Bitensky I.S., Dimirev P., Sundquist B.U.R.* On model of fullerene formation from polymer under MeV ion impact // Nucl. Instr. Meth. B. 1998. V. 82. P. 356–361.
37. *Дидык А. Ю., Робук В. Н., Семина В. Л.* Температура в треке тяжелого иона с высокими удельными ионизационными потерями энергии в модели термического пика в материалах. Препринт ОИЯИ Р17-2003-30. Дубна, 2003.
38. *Самарский А. А.* Теория разностных схем. М.: Наука, 1983. С. 258–276.
39. *Самарский А. А., Гулин А. В.* Устойчивость разностных схем. М.: Наука, 1973. С. 308–338.
40. *Турчак Л. И.* Основы численных методов. М.: Наука, 1987. С. 277–284.
41. *Амирханов И. В. и др.* Численное исследование 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.

Получено 30 сентября 2005 г.

Корректор *Е. В. Сабеева*

Подписано в печать 9.11.2005.

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

Усл. печ. л. 1. Уч.-изд. л. 1,2. Тираж 320 экз. Заказ № 55084.

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

E-mail: publish@pds.jinr.ru

www.jinr.ru/publish/