

P11-2007-105

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

**ПРИМЕНЕНИЕ НЕЛИНЕЙНОЙ МОДЕЛИ  
ТЕРМИЧЕСКОГО ПИКА  
ДЛЯ РАСЧЕТА ТЕМПЕРАТУРНЫХ ЭФФЕКТОВ  
В ДВУХСЛОЙНЫХ СТРУКТУРАХ ПРИ ОБЛУЧЕНИИ ИХ  
ТЯЖЕЛЫМИ ИОНАМИ ВЫСОКИХ ЭНЕРГИЙ**

Направлено на VI Национальную конференцию по применению  
рентгеновского, синхротронного излучений нейтронов и электронов для  
исследования материалов (РСНЭ-2007), Москва, 12–17 ноября 2007 г.

Амирханов И. В. и др.

P11-2007-105

Применение нелинейной модели термического пика для расчета температурных эффектов в двухслойных структурах при облучении их тяжелыми ионами высоких энергий

В рамках модели термического пика в трехмерном случае рассчитаны температуры в двухслойных структурах, представляющих собой массивную подложку и нанесенный на нее относительно тонкий слой из другого материала, при их облучении быстрыми тяжелыми ионами с высокими ионизационными потерями энергии. Детально исследованы изменения температур на границе раздела такой двухслойной структуры на примере Ni-W в зависимости от величины коэффициента конвективного теплообмена  $\theta$ , характеризующего изменение градиента температур на границе раздела, а следовательно, и определяющего тип теплового контакта. Расчеты проведены как для нелинейного случая с теплофизическими константами, зависящими от температуры, так и для линейного случая с не зависящими от температуры теплофизическими константами. Установлено, что при учете зависимости теплофизических параметров от температуры рассчитанные температуры электронного газа и кристаллической решетки значительно меньше, чем в случае постоянных теплофизических параметров, взятых при комнатной температуре. Особенность нелинейной модели в том, что тепловые процессы в кристаллической решетке значительно медленнее, чем в линейном случае. Показано, что при увеличении коэффициента  $\theta$  происходит переход от случая неидеального контакта к идеальному контакту.

Работа выполнена в Лаборатории информационных технологий ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна, 2007

Amirkhanov I. V. et al.

P11-2007-105

The Use of Nonlinear Thermal Spike Model for Calculations of Temperature Effects at Two Layer Structures under Their Irradiation with High Energy Heavy Ions

Temperatures at two layer structures, presenting massive substrate and surface cover by relatively thin layer from another material, under irradiation with swift heavy ions with high ionizing energy loss in frame of thermal spike model in three dimensional case were calculated. The temperature changes near the separate boundary of such a two layer structure on the example of Ni-W of the convective warm exchanging coefficient  $\theta$  are studied in detail. Parameter  $\theta$  characterizes the changes of temperature gradient near the separate boundary, i. e. determines the type of heat contact. It was established that calculated temperatures of electronic and lattice subsystems for nonlinear model (characterized by thermal physical coefficients depending on the temperature) are much less than ones in the linear model (characterized by thermal physical coefficients without dependence on the temperature). The peculiarity of the nonlinear model is that the characteristic time of the thermal processes in such a crystalline lattice are much slower than in the linear model. It was shown that transition from nonideal case of heat contact to ideal case of heat contact takes place at increasing of coefficient  $\theta$ .

The investigation has been performed at the Laboratory of Information Technologies, JINR.

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna, 2007

## ВВЕДЕНИЕ

В последние годы значительные усилия ученых были направлены на создание слоистых структур с модифицированными свойствами поверхности, представляющих собой достаточно тонкое (до нескольких микрометров) покрытие, нанесенное тем или иным способом на более массивную подложку [1–5]. Такая структура за счет присущих материалу тонкого покрытия свойств позволяет в целом улучшить коррозионные, теплофизические и электрофизические свойства, а также повысить износостойкость изделий из двухслойных материалов при сохранении механических свойств материала подложки. Часто такие материалы не образуют гомогенизированный твердый раствор с выделением новой фазы, т.е. они не смешиваются друг с другом [1–3]. Поэтому задача увеличения коэффициента адгезии, т.е. взаимного перемешивания компонент двухслойных структур, представляется весьма важной. В частности, в ряде работ для увеличения взаимного перемешивания компонент вблизи границы раздела используются быстрые тяжелые ионы с высокими ионизационными потерями энергии и проективными пробегами, заведомо превышающими толщину нанесенного покрытия [1, 2, 4, 5]. В рамках модели термического пика [6–17] при таком воздействии за счет высоких ионизационных потерь энергии  $S_{\text{inel}} = -(\partial E/\partial z)_{\text{inel}}$  иона, прошивающего оба слоя, и последующего разогрева области вдоль траектории иона происходит резкое возрастание температуры и, как следствие, увеличение взаимного перемешивания компонент (адгезии) [1, 2, 4, 5]. Интерес к изучению таких процессов обусловлен особенностями радиационных изменений в материалах, которые имеют не только фундаментальное значение для понимания основных закономерностей взаимодействия тяжелых заряженных частиц с конденсированными средами, но и важны для прикладных целей, а именно для использования данных эффектов в развитии новых технологий и совершенствовании уже имеющихся.

Целью настоящей работы является применение модели термического пика в трехмерном случае [18–22] для вычисления температуры решетки ( $T_i$ ) и электронов ( $T_e$ ) в двухслойном материале на примере структуры Ni(2 мкм)/W при облучении ионами  $^{209}\text{Bi}$  с энергией 710 МэВ с учетом зависимости теплофизических параметров от температуры при неидеальном тепловом контакте на границе раздела материалов.

## 1. МОДЕЛЬ ТЕМПЕРАТУРНОГО ПОВЕДЕНИЯ ДВУХСЛОЙНОГО МАТЕРИАЛА

В работах [6–17] 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 вычислений и оценок температуры решетки в «треке» тяжелого иона [6–8, 20–25]. С учетом анизотропии и аксиальной симметрии неупругих потерь энергии тяжелого иона высокой энергии  $S_{\text{inel}} = -(\partial E/\partial z)_{\text{inel}}$  система уравнений для определения решеточной и электронной температур (модель термического пика) в цилиндрической системе координат в обоих слоях может быть записана в виде [18–21]

$$\left\{ \begin{array}{l} C_{e,v}(T_{e,v}) \frac{\partial T_{e,v}}{\partial t} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \chi_{e,v}(T_{e,v}) \frac{\partial T_{e,v}}{\partial r} \right) + \\ \quad + \frac{\partial}{\partial z} \left( \chi_{e,v}(T_{e,v}) \frac{\partial T_{e,v}}{\partial z} \right) - \\ \quad - g_v(T_{e,v}) (T_{e,v} - T_{i,v}) + A_v(r, z, t), \\ C_{i,v}(T_{i,v}) \frac{\partial T_{i,v}}{\partial t} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \chi_{i,v}(T_{i,v}) \frac{\partial T_{i,v}}{\partial r} \right) + \\ \quad + \frac{\partial}{\partial z} \left( \chi_{i,v}(T_{i,v}) \frac{\partial T_{i,v}}{\partial z} \right) + g_v(T_{e,v}) (T_{e,v} - T_{i,v}). \end{array} \right. \quad (1)$$

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. Индекс  $v = 1$  в уравнениях относится к первому слою, т. е. при изменении координаты  $z$  в интервале  $0 \leq z \leq H$ , а индекс  $v = 2$  относится ко второму слою. Здесь  $T_{e,v}(r, z, t)$  и  $T_{i,v}(r, z, t)$  ( $v = 1, 2$ ) — температуры в электронных и решеточных подсистемах в обоих слоях;  $C_{e,v}(T_{e,v})$ ,  $C_{i,v}(T_{i,v})$  и  $\chi_{e,v}(T_{e,v})$ ,  $\chi_{i,v}(T_{i,v})$  — соответственно теплоемкости и теплопроводности электронов и решеток, зависящие от температуры;  $g_v(T_{e,v})$  — коэффициенты, характеризующие взаимодействия электронных и решеточных подсистем (в общем случае зависящие от температуры электронов). Функция  $A(r, z, t)$  — объемная плотность вносимых ионом мощностей в обоих материалах — может быть представлена в виде наиболее часто используемого выражения [18–21]

$$A_v(r, z, t) = b \exp\left(-\frac{(t-t_0)^2}{2\delta_t^2}\right) \exp\left(-\frac{r}{r_0}\right) S_{\text{inel}}(z),$$

где  $S_{\text{inel}}(z)$  — зависимость удельных ионизационных потерь энергии ионов от глубины в мишени. Здесь  $r_0 = 1$  нм — скорость экспоненциального спада,

или пространственная ширина высоковозбужденной области;  $t_0 = 10^{-15}$  с — время достижения электронами равновесного распределения [14].

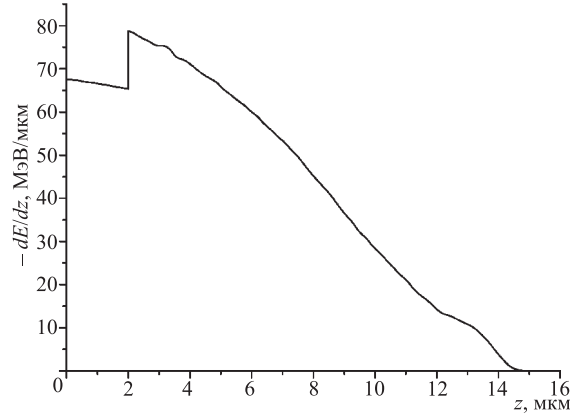


Рис. 1. Зависимость удельных ионизационных потерь энергии  $S_{\text{inel}}(z) = -(\partial E/\partial z)_{\text{inel}}$

Функция  $S_{\text{inel}}(z)$  рассчитана по наиболее часто используемой компьютерной программе SRIM-2003 и приведена на рис. 1 для ионов  $^{209}\text{Bi}$  с энергией 710 МэВ при облучении двухслойной структуры Ni(2 мкм)/W.

Систему (1) решаем со следующими начальными и граничными условиями:

$$T_{e,v}(r, z, t = 0) = T_0, \quad T_{i,v}(r, z, t = 0) = T_0, \quad (2)$$

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

$$T_{e,v}(r = R_{\text{max}}, z, t) = T_0, \quad T_{i,v}(r = R_{\text{max}}, z, t) = T_0, \quad (3)$$

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

$$T_{e,2}(r, z = Z_{\text{max}}, t) = T_0, \quad T_{i,2}(r, z = Z_{\text{max}}, t) = T_0,$$

где

$$v = 1, 2, \quad 0 < r < R_{\text{max}}, \quad 0 < z < Z_{\text{max}}, \quad 0 < t < t_{\text{max}}, \quad T_0 = 300 \text{ К},$$

и условиями сопряжения на границе раздела двух материалов

$$\chi_{e,1}(T_{e,1}) \frac{\partial T_{e,1}(r, z = H - 0, t)}{\partial z} = \chi_{e,2}(T_{e,2}) \frac{\partial T_{e,2}(r, z = H + 0, t)}{\partial z},$$

$$\begin{aligned}
& -\chi_{e,1}(T_{e,1}) \frac{\partial T_{e,1}(r, z = H - 0, t)}{\partial z} = \\
& = \theta [T_{e,1}(r, z = H - 0, t) - T_{e,2}(r, z = H + 0, t)], \quad (4)
\end{aligned}$$

$$\chi_{i,1}(T_{i,1}) \frac{\partial T_{i,1}(r, z = H - 0, t)}{\partial z} = \chi_{i,2}(T_{i,2}) \frac{\partial T_{i,2}(r, z = H + 0, t)}{\partial z},$$

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

где  $0 < r < R_{\max}$ ,  $0 < t < t_{\max}$ ,  $\theta$  — коэффициент конвективной теплоотдачи.

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

В условиях (4)  $\theta$  — коэффициент конвективной теплоотдачи, который, в отличие от  $\chi$ , не является физической характеристикой тела. Если использовать термодинамическую аналогию, то коэффициент конвективной теплоотдачи можно рассматривать как «функцию процесса», зависящую от большого числа различных факторов: формы и размеров тела, температуры, давления, физических свойств среды и др. Диапазон численных значений  $\theta$  составляет  $10^{-3} - 10^2$  Вт/(см<sup>2</sup> · К) [25].

При решении системы уравнений (1) целесообразно ввести безразмерные переменные, а именно:

$$\bar{T}_{e,v} = \frac{T_{e,v}}{T_0}, \quad \bar{T}_{i,v} = \frac{T_{i,v}}{T_0}, \quad \bar{r} = \frac{r}{\Delta r}, \quad \bar{z} = \frac{z}{\Delta z}, \quad \bar{t} = \frac{t}{\Delta t},$$

где  $\Delta r$ ,  $\Delta z$  и  $\Delta t$  — единицы измерения расстояния и времени. Эти единицы выбраны в виде  $\Delta t = \alpha t_0$  и  $\Delta r = \Delta z = \alpha r_0$ . Здесь  $\alpha = 100$  — произвольная безразмерная константа. Тогда систему уравнений (1) можно записать в виде

(надчеркивание безразмерных величин опущено)

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial T_{e,v}}{\partial t} = \frac{B_1}{C_{e,v}(T_{e,v})} \left[ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \chi_{e,v}(T_{e,v}) \frac{\partial T_{e,v}}{\partial r} \right) + \right. \\ \left. + \frac{\partial}{\partial z} \left( \chi_{e,v}(T_{e,v}) \frac{\partial T_{e,v}}{\partial z} \right) \right] - \\ - \frac{B_3 g_v(T_{e,v})}{C_{e,v}(T_{e,v})} (T_{e,v} - T_{i,v}) + \frac{A_v(r, z, t)}{C_{e,v}(T_{e,v})}, \\ \frac{\partial T_{i,v}}{\partial t} = \frac{B_2}{C_{i,v}(T_{i,v})} \left[ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \chi_{i,v}(T_{i,v}) \frac{\partial T_{i,v}}{\partial r} \right) + \right. \\ \left. + \frac{\partial}{\partial z} \left( \chi_{i,v}(T_{i,v}) \frac{\partial T_{i,v}}{\partial z} \right) \right] + \frac{B_4 g_v(T_{e,v})}{C_{i,v}(T_{i,v})} (T_{e,v} - T_{i,v}), \end{array} \right. \quad (5)$$

где

$$B_1 = \frac{\chi_{e,v}(T_0) \alpha t_0}{C_{e,v}(T_0) (\alpha r_0)^2}, \quad B_2 = \frac{\chi_{i,v}(T_0) \alpha t_0}{C_{i,v}(T_0) (\alpha r_0)^2}, \\ B_3 = \frac{g_v(T_0) \alpha t_0}{C_{e,v}(T_0)}, \quad B_4 = \frac{g_v(T_0) \alpha t_0}{C_{i,v}(T_0)}.$$

При комнатной температуре  $T_0 = 300$  К теплофизические параметры никеля и вольфрама следующие [6, 7]:

$$C_e^{\text{Ni}}(T_0) = 2,733 \cdot 10^{-2} \frac{\text{Дж}}{\text{см}^3 \cdot \text{К}}, \quad \chi_e^{\text{Ni}}(T_0) = 4,11 \frac{\text{Вт}}{\text{см} \cdot \text{К}}, \\ g^{\text{Ni}}(T_0) = 4,05 \cdot 10^{12} \frac{\text{Вт}}{\text{см}^3 \cdot \text{К}}, \quad C_e^{\text{W}}(T_0) = 3,5 \cdot 10^{-2} \frac{\text{Дж}}{\text{см}^3 \cdot \text{К}}, \\ \chi_e^{\text{W}}(T_0) = 5,25 \frac{\text{Вт}}{\text{см} \cdot \text{К}}, \quad g^{\text{W}}(T_0) = 1,24 \cdot 10^{12} \frac{\text{Вт}}{\text{см}^3 \cdot \text{К}}, \\ C_i^{\text{Ni}}(T_0) = 3,91 \frac{\text{Дж}}{\text{см}^3 \cdot \text{К}}, \quad \chi_i^{\text{Ni}}(T_0) = 0,91 \frac{\text{Вт}}{\text{см} \cdot \text{К}}, \\ S_{\text{inel}}^{\text{Ni}}(0) = 1,09 \cdot 10^{-7} \frac{\text{Дж}}{\text{см}}, \quad C_i^{\text{W}}(T_0) = 2,71 \frac{\text{Дж}}{\text{см}^3 \cdot \text{К}}, \\ \chi_i^{\text{W}}(T_0) = 1,74 \frac{\text{Вт}}{\text{см} \cdot \text{К}}, \quad S_{\text{inel}}^{\text{W}}(H) = 1,36 \cdot 10^{-7} \frac{\text{Дж}}{\text{см}}.$$

Нелинейные параметры модели, нормированные на значения при комнатной температуре  $T_0 = 300$  К, имеют следующий вид [6]:

$$C_e^{\text{Ni}}(T_e) = \begin{cases} T_e & \text{при } T_e \leq T_F^{\text{Ni}} \\ 128,16 & \text{при } T_e > T_F^{\text{Ni}}, \end{cases}$$

$$C_e^W(T_e) = \begin{cases} T_e & \text{при } T_e \leq T_F^W, \\ 224,3 & \text{при } T_e > T_F^W, \end{cases}$$

$$\chi_e^{\text{Ni}}(T_e) = \begin{cases} \frac{0,973}{T_e} + 0,026 \cdot T_e & \text{при } T_e \leq T_F^{\text{Ni}}, \\ 3,53 \cdot 10^{-4} \cdot T_e^{3/2} & \text{при } T_e > T_F^{\text{Ni}}, \end{cases}$$

$$\chi_e^W(T_e) = \begin{cases} \frac{0,973}{T_e} + 0,026 \cdot T_e & \text{при } T_e \leq T_F^W, \\ 2,9917 \cdot 10^{-4} \cdot T_e^{3/2} & \text{при } T_e > T_F^W, \end{cases}$$

$$C_i^{\text{Ni}}(T_i) = \begin{cases} 0,876 + 0,128 \cdot T_i - 0,667 \cdot T_i^2 & \text{при } T_i \leq T_{\text{melt}}^{\text{Ni}}, \\ 1,393 & \text{при } T_i > T_{\text{melt}}^{\text{Ni}}, \end{cases}$$

$$C_i^W(T_i) = \begin{cases} 0,906 + 0,113 \cdot T_i - 0,0219 \cdot T_i^2 + 0,0022 \cdot T_i^3 & \text{при } T_i \leq T_{\text{melt}}^W, \\ 1,2 & \text{при } T_i > T_{\text{melt}}^W, \end{cases}$$

$$\chi_i^{\text{Ni}}(T_i) = \begin{cases} 3,079 - 3,53 \cdot T_i + 1,793 \cdot T_i^2 - 0,3667 \cdot T_i^3 + 0,0264 \cdot T_i^4 & \text{при } T_i \leq T_{\text{melt}}^{\text{Ni}}, \\ 0,4528 & \text{при } T_i > T_{\text{melt}}^{\text{Ni}}, \end{cases}$$

$$\chi_i^W(T_i) = \begin{cases} 1,509 + 0,717 \cdot T_i + 0,241 \cdot T_i^2 - 0,0351 \cdot T_i^3 + 0,00178 \cdot T_i^4 & \text{при } T_i \leq T_{\text{melt}}^W, \\ 0,5632 & \text{при } T_i > T_{\text{melt}}^W, \end{cases}$$

$$g(T_e) = \frac{1}{\chi_e(T_e)},$$

где  $T_F^{\text{Ni}} = 454,3$ ,  $T_F^W = 736,6$  и  $T_{\text{melt}}^{\text{Ni}} = 5,75$ ;  $T_{\text{melt}}^W = 11$  — безразмерные температуры Ферма и плавления для материалов.



## 2. МЕТОД ЧИСЛЕННОГО РЕШЕНИЯ

Для численного решения системы будем использовать явную двухслойную конечно-разностную схему порядка аппроксимации  $O(h_t + h_r^2 + h_z^2)$  [26–28].

Для проверки сходимости разностных схем по  $z$  проводился численный анализ полученных решений при фиксированных шагах  $h_r, h_t$  и на сгущающейся сетке по  $z$ , т. е. при  $h_z, h_z/2, h_z/4$  ( $h_r = 5 \cdot 10^{-3}$ ,  $h_z = 3 \cdot 10^{-2}$ ,  $h_t = 3 \cdot 10^{-6}$ ). Ниже представлен результат численного анализа в точке  $r = 0, z = 0$ :

$$\max_{0 \leq t \leq 30} \left| T_{h_z}^e(0, 0, t) - T_{h_z/2}^e(0, 0, t) \right| \approx 8,3 \cdot 10^{-7} \quad \text{при } t \approx 0,075;$$

$$\max_{0 \leq t \leq 30} \left| T_{h_z/2}^e(0, 0, t) - T_{h_z/4}^e(0, 0, t) \right| \approx 4,17 \cdot 10^{-7} \quad \text{при } t \approx 0,074;$$

$$\max_{0 \leq t \leq 30} \left| T_{h_z}^i(0, 0, t) - T_{h_z/2}^i(0, 0, t) \right| \approx 5,32 \cdot 10^{-8} \quad \text{при } t \approx 0,029;$$

$$\max_{0 \leq t \leq 30} \left| T_{h_z/2}^i(0, 0, t) - T_{h_z/4}^i(0, 0, t) \right| \approx 2,7 \cdot 10^{-8} \quad \text{при } t \approx 0,029.$$

Как видно, найденные разности профилей температур на сгущающейся по  $z$  сетке уменьшаются.

## 3. ОБСУЖДЕНИЕ ПОЛУЧЕННЫХ РЕЗУЛЬТАТОВ

При решении системы уравнений (5) с соответствующими начальными и граничными условиями и условиями сопряжения были получены и проанализированы временные и координатные зависимости температур электронного газа  $T_e(r, z, t)$  и решетки  $T_i(r, z, t)$  двухслойной структуры Ni(2 мкм)/W при облучении ее ионами висмута с энергией 710 МэВ.

На рис. 2, 3 представлены зависимости от времени температур электронного газа (а) и кристаллической решетки (б) на поверхности образца никеля на различных расстояниях  $r$  от траектории иона в рамках линейной, т. е. без зависимости теплофизических параметров от температуры (рис. 2), и нелинейной (с зависимостью теплофизических параметров от температуры (рис. 3)) моделей термического пика. Из сравнения этих графиков видно, что в нелинейной модели температуры электронного газа и кристаллической решетки значительно меньше, чем в линейной модели. Особенно следует подчеркнуть, что в нелинейной модели тепловые процессы в кристаллической решетке происходят значительно медленнее, чем в линейном случае.

Аналогичные выводы можно сделать и для второго слоя (вольфрам) из рис. 4, 5, где представлены зависимости от времени температур электронного

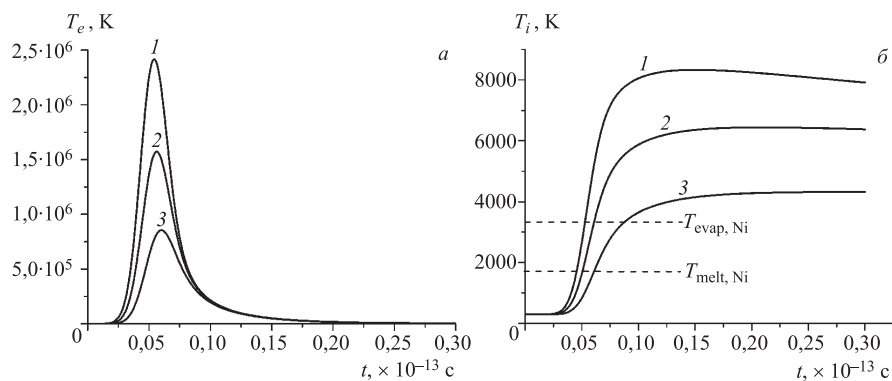


Рис. 2. Зависимость от времени температуры электронного газа (а) и кристаллической решетки (б) на поверхности образца первого слоя (никель) при облучении ионами висмута с энергией 710 МэВ на различных расстояниях  $r$  (1 —  $r = 0$ ; 2 —  $r = 20$ ; 3 —  $r = 40$  Å) от траектории иона в рамках *линейной* модели термического пика. Штриховыми линиями обозначены температуры плавления и испарения никеля

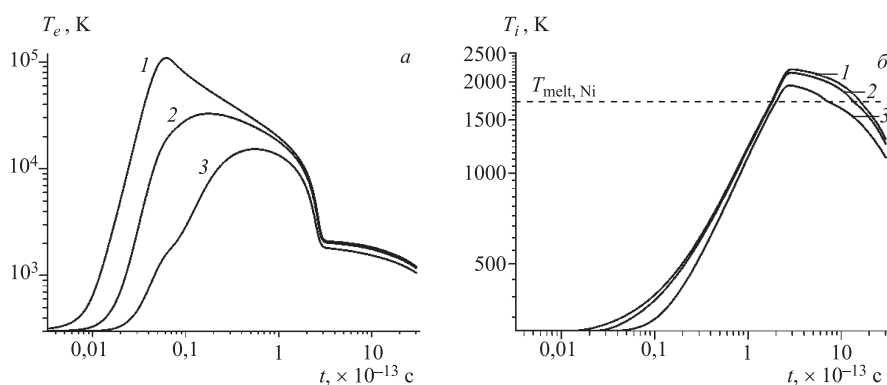


Рис. 3. Зависимость от времени температуры электронного газа (а) и кристаллической решетки (б) на поверхности образца первого слоя (никель) при облучении ионами висмута с энергией 710 МэВ на различных расстояниях  $r$  (1 —  $r = 0$ ; 2 —  $r = 50$ ; 3 —  $r = 100$  Å) от траектории иона в рамках *нелинейной* модели термического пика. Штриховой линией обозначена температура плавления никеля

газа (а) и кристаллической решетки (б) в точке  $z = H + h_z$  на различных расстояниях  $r$  от траектории иона в рамках линейной (рис. 4) и нелинейной (рис. 5) моделей термического пика.

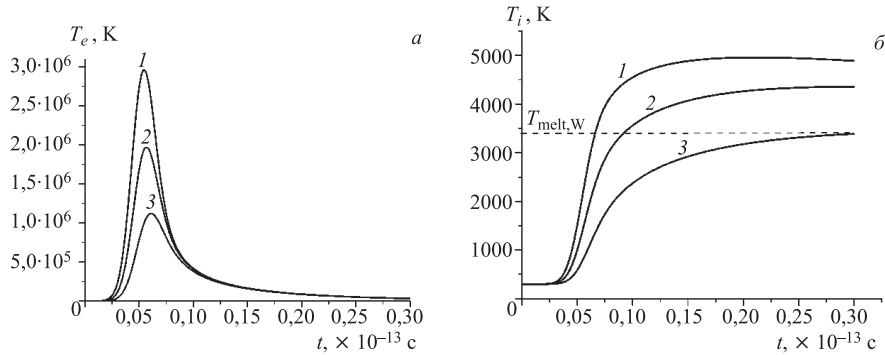


Рис. 4. Зависимость от времени температуры электронного газа (а) и кристаллической решетки (б) при  $z = H + h_z$  и облучении ионами висмута с энергией 710 МэВ на различных расстояниях  $r$  (1 —  $r = 0$ ; 2 —  $r = 20$ ; 3 —  $r = 40$  Å) от траектории иона в рамках *линейной* модели термического пика. Штриховой линией обозначена температура плавления вольфрама

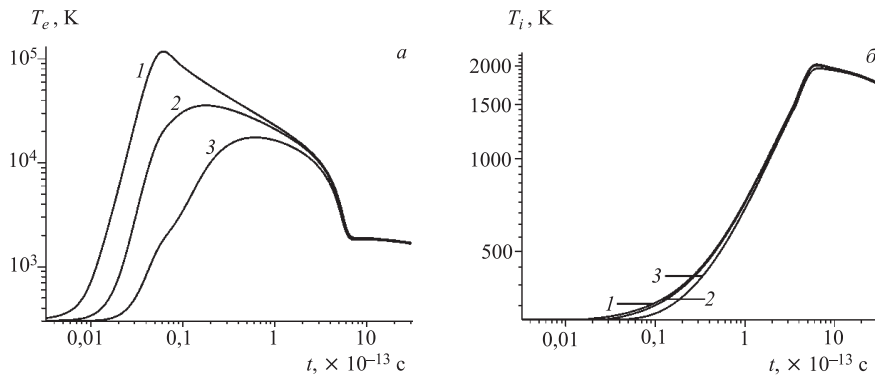


Рис. 5. Зависимость от времени температуры электронного газа (а) и кристаллической решетки (б) при  $z = H + h_z$  и облучении ионами висмута с энергией 710 МэВ на различных расстояниях  $r$  (1 —  $r = 0$ ; 2 —  $r = 50$ ; 3 —  $r = 100$  Å) от траектории иона в рамках *нелинейной* модели термического пика

На рис. 6 представлены временные зависимости разности температур в слоях на границе раздела двух материалов (т.е. при  $z = H = 2 \cdot 10^4$  Å) для электронной подсистемы (а) и кристаллической решетки (б) в случае неидеального контакта для различных значений эффективного коэффициента конвективной теплоотдачи  $\theta = 10^4, 10^5, 10^6, 10^7$  в рамках линейной модели термического пика. Отметим, что при значениях  $\theta$ , взятых из интервала, указанного в [25], решения системы качественно не отличаются и совпадают с

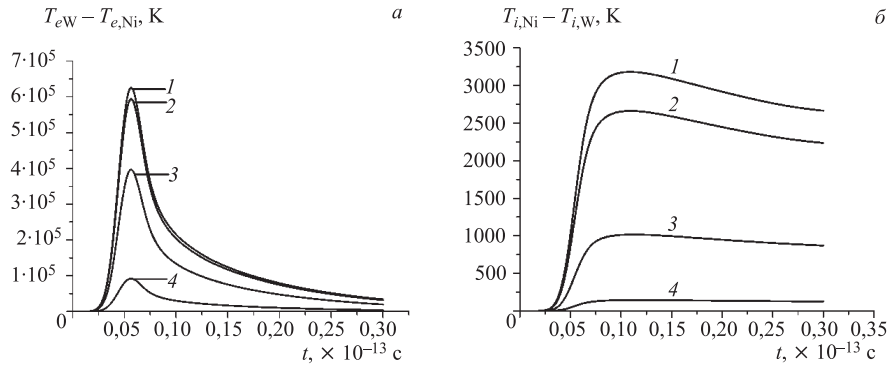


Рис. 6. Временная зависимость разности температур (в абсолютных значениях) в слоях на границе раздела двух материалов для электронной подсистемы (а) и кристаллической решетки (б) в случае неидеального контакта для различных значений эффективного коэффициента конвективной теплоотдачи  $\theta$  (1 —  $\theta = 10^4$ ; 2 —  $\theta = 10^5$ ; 3 —  $\theta = 10^6$ ; 4 —  $\theta = 10^7$ ) в рамках линейной модели термического пика

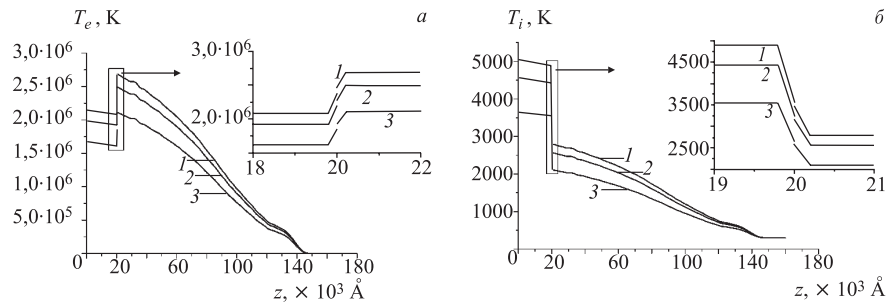


Рис. 7. Зависимость электронных (а) и решеточных (б) температур в слоях от глубины  $z$  (глубина раздела слоев  $H = 20 \cdot 10^3 \text{ \AA}$ ) в рамках линейной модели ( $\theta = 10^7$ ,  $t = 0,06 \cdot 10^{-13}$  с) на различных расстояниях  $r$  (1 —  $r = 0$ ; 2 —  $r = 20$ ; 3 —  $r = 40 \text{ \AA}$ ) от траектории иона

результатами при  $\theta = 10^4$ . Для исследования влияния этого коэффициента мы взяли его значение за пределами указанного интервала. Видно, что при увеличении коэффициента конвективной теплоотдачи  $\theta$  разности температур на границе уменьшаются.

На рис. 7, 8 представлены зависимости электронных и решеточных температур от  $z$  в рамках линейной и нелинейной моделей термического пика для различных расстояний от оси трека  $r = 0, 20, 40 \text{ \AA}$ . Видно, что решеточная температура в первом слое превышает температуру второго слоя и растет более быстро из-за соотношения коэффициентов, характеризующих тепловые процессы.

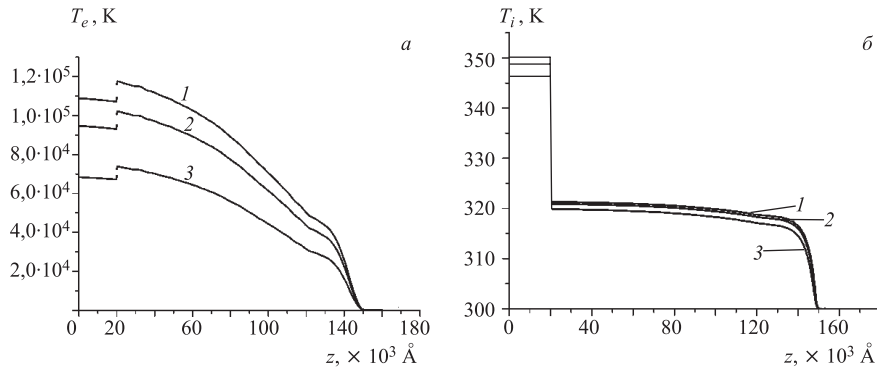


Рис. 8. Зависимость электронных (а) и решеточных (б) температур в слоях от глубины  $z$  (глубина раздела слоев  $H = 20 \cdot 10^3 \text{ \AA}$ ) в рамках *нелинейной* модели ( $\theta = 10^7$ ,  $t = 0,06 \cdot 10^{-13} \text{ с}$ ) на различных расстояниях  $r$  (1 —  $r = 0$ ; 2 —  $r = 20$ ; 3 —  $r = 40 \text{ \AA}$ ) от траектории иона

## ВЫВОДЫ

В работе на основе линейной и нелинейной моделей термического пика получены результаты численного анализа температурных эффектов в двух-слойном материале Ni(2 мкм)/W при облучении ионами  $^{209}\text{Bi}$  с энергией 710 МэВ при неидеальных условиях теплопередачи (теплового контакта) в плоскости стыковки материалов. Выполнен численный анализ точности схемы вычислений. По результатам вычислительных экспериментов можно сделать следующие выводы.

1. Как показано численным анализом модели теплового пика, все процессы в линейной модели (достижение максимумов температур, времена выравнивания температур в электронной и решеточной подсистемах, времена достижения температур плавления и испарения с поверхности нанесенного слоя Ni) происходят за меньшие времена, чем в нелинейной модели.
2. При значительном увеличении коэффициента конвективной теплоотдачи  $\theta$  неидеальные условия сопряжения приближаются к идеальным условиям.
3. В линейной модели в точке  $r = 0$ ,  $z = 0$  температура кристаллической решетки уже через  $t = 4,5 \cdot 10^{-15} \text{ с}$  для никеля и  $t = 6,6 \cdot 10^{-15} \text{ с}$  для вольфрама превышает температуру плавления, а в нелинейном случае этот процесс для никеля наступает только через  $t = 1,8 \cdot 10^{-13} \text{ с}$ .
4. Выравнивание температур электронного газа и кристаллической решетки в линейной модели наступает через  $t = 0,25 \cdot 10^{-15} \text{ с}$  для никеля

и  $t = 0,35 \cdot 10^{-15}$  с для вольфрама, а в нелинейной модели через  $t = 3 \cdot 10^{-13}$  с для никеля и  $t = 6,5 \cdot 10^{-13}$  с для вольфрама.

5. На основе полученных результатов можно выделить характерные размеры областей, где температура превышает температуру плавления (и испарения для первого слоя в линейной модели). Поверхность уровня температуры, равной температуре плавления, достигает максимального размера для никеля  $D_{\max}^{\text{melt}}(z=0) \approx 222 \text{ \AA}$ ,  $D_{\max}^{\text{melt}}(z=H) \approx 219 \text{ \AA}$ , для вольфрама  $D_{\max}^{\text{melt}}(z=H) \approx 80 \text{ \AA}$  и  $Z_{\max}^{\text{melt}}(r=0) \approx 4,4 \cdot 10^4 \text{ \AA}$  ( $D_{\max}^{\text{melt}}$  — оценка максимального диаметра и  $Z_{\max}^{\text{melt}}$  — оценка максимальной глубины расплавленной области). Аналогичная поверхность для температуры испарения в никеле имеет размеры  $D_{\max}^{\text{evap}}(z=0) \approx 149 \text{ \AA}$  и  $D_{\max}^{\text{melt}}(z=H) \approx 147 \text{ \AA}$ .

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, гранты №06-01-00228 и №05-01-00645-а.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. *Bolse W., Schattat B.* Atomic mixing in thin films subsystems by swift heavy ions // Nucl. Instr. Meth. B. 2002. V. 190. P. 173–176.
2. *Li Z. C., Yu D. P., Liu B. X.* Manipulation of ordered layered structures by interface-assisted ion-beam mixing in immiscible Ag-Co and Ag-Ni systems // Phys. Rev. B. 2002. V. 65. P. 245403-1–245403-6.
3. *Nastasi M., Mayer J. W.* Ion Beam Mixing and Liquid Interdiffusion // Rad. Eff. and Def. in Solids. 1994. V. 130–131. P. 367–385.
4. *Leguay R. et al.* // Nucl. Instr. Meth. B. 1995. V. 106. P. 28–33.
5. *Bolse W.* // Surf. And Coating Techn. 2002. V. 158–159. P. 1–7.
6. *Wang Z. G. et al.* // J. Phys.: Condens. Matter. 1994. V. 6, No. 34. P. 6733–6750.
7. *Dufour Ch. et al.* // J. Phys.: Condens. Matter. 1993. V. 5, No. 26. P. 4573–4584.
8. *Audouard A. et al.* // J. Phys.: Condens. Matter. 1993. V. 5, No. 5. P. 995–1018.
9. *Fleisher R. L., Price P. B., Walker R. M.* // J. Appl. Phys. 1965. V. 36, No. 11. P. 3645–3652.
10. *Fleisher R. L., Price P. B., Walker R. M.* Nuclear Track in Solids. Los Angeles: University of California, 1975.
11. *Seitz F., Koehler J. S.* // Sol. St. Phys. 1956. V. 2. P. 251.
12. *Vineyard G. H.* Thermal spikes and activated processes // Radiat. Eff. 1976. V. 29, No. 4. P. 245–248.
13. *Лифшиц И. М., Каганов М. И., Танатаров Л. В.* К теории релаксационных изменений в металлах // АЭ. 1959. Т. 6. С. 391–402.
14. *Каганов М. И., Лифшиц И. М., Танатаров Л. В.* Релаксация между электронами и решеткой // ЖЭТФ. 1956. Т. 31, № 2(8). С. 232–237.

15. 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.
16. Давыдов А. А., Калинин 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.
17. 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.
18. Амирханов И. В. и др. Температура в двухслойных материалах вдоль проективного пробега тяжелого иона высокой энергии в модели термического пика // Письма в ЭЧАЯ. 2006. Т. 3, № 1(130). С. 63–75.
19. Амирханов И. В. и др. Применение модели термического пика для расчета температуры в двухслойных структурах вдоль проективного пробега тяжелого иона высокой энергии // Письма в ЭЧАЯ. 2006. Т. 3, № 5(134). С. 80–91.
20. Amirkhonov I. V. et al. Investigation of heat processes in materials under irradiation by swift heavy ions in frame of general thermal spike model // Crystallography Report. 2006. No. 51, Suppl.1. P. S32–S43.
21. Амирханов И. В. и др. Распыление твердых тел под действием тяжелых ионов и температурные эффекты в электронной и решеточной подсистемах // ЭЧАЯ. 2006. Т. 37, вып. 6. С. 1592–1644.
22. Cheblukov Y. N. et al. The Influence of the Defect Structure on the Surface Sputtering of Metals under the Irradiation of Swift Heavy Ions in the Inelastic Energy Loss Range // Nukleonika. 2004. V. 49, No. 1. P. 15–21.
23. Varanov I. et al. // Nucl. Instr. Meth. B. 2002. V. 193. P. 798–803.
24. Varanov I. et al. // Nucl. Instr. Meth. B. 2002. V. 193. P. 809–815.
25. Луканин В. Н. и др. Теплотехника. М.: Высш. шк., 2003. С. 281.
26. Самарский А. А. Теория разностных схем. М.: Наука, 1983. С. 258–276.
27. Самарский А. А., Гулин А. В. Устойчивость разностных схем. М.: Наука, 1973. С. 308–338.
28. Турчак Л. И. Основы численных методов. М.: Наука, 1987. С. 277–284.

Получено 16 июля 2007 г.

Редактор *Е. В. Сабеева*

Подписано в печать 02.11.2007.

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

Усл. печ. л. 1,0. Уч.-изд. л. 1,23. Тираж 315 экз. Заказ № 55946.

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

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

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