

P11-2004-165

И. В. Амирханов, А. Ю. Дидык, Е. В. Земляная,
И. В. Пузынин, Т. П. Пузынина, Н. Р. Саркар,
И. Сархатов¹, В. К. Семина, З. А. Шарипов², А. Хофман

ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ТЕМПЕРАТУРНЫХ
ЭФФЕКТОВ В МАТЕРИАЛАХ ПРИ ОБЛУЧЕНИИ
ИХ ТЯЖЕЛЫМИ ИОНАМИ ВЫСОКИХ ЭНЕРГИЙ
В РАМКАХ УРАВНЕНИЙ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ
ДЛЯ ЭЛЕКТРОНОВ И РЕШЕТКИ

Направлено в журнал «Письма в ЭЧАЯ»

¹Таджикский государственный национальный университет, Душанбе

²Худжандский государственный университет, Худжанд, Таджикистан

Амирханов И. В. и др.

P11-2004-165

Численное исследование температурных эффектов в материалах при облучении их тяжелыми ионами высоких энергий в рамках уравнений теплопроводности для электронов и решетки

Система уравнений для температуры электронного газа и решетки вокруг и вдоль траектории тяжелого иона урана с энергией 700 МэВ в никеле при постоянных значениях теплоемкости и теплопроводности, взятых при комнатной температуре, 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 и испарения материала с поверхности. Сделаны оценки размера областей с максимальным радиусом и глубиной в мишени, где происходят процессы плавления и испарения.

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

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна, 2004

Amirkhanov I. V. et al.

P11-2004-165

Numerical Study of Temperature Effects in Materials Exposed to High Energy Heavy Ions in Frames of Temperature Conductivity Equations for Electrons and Lattice

A system of equations for electron gas and lattice around and along the trajectory of a 700 MeV uranium heavy ion in nickel at the constants of heat capacity and heat conductivity taken at room temperature, is solved numerically in the cylindric axial-symmetric coordinate system. Based on the temperature dependence upon radius and depth around the ion trajectory, one can conclude that the ionizing energy loss is enough for the melting and evaporation processes in the target. The maximal sizes of radius and depth in target where the melting and evaporation processes can take place, have been estimated.

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

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna, 2004

ВВЕДЕНИЕ

Исследования воздействия высокоионизирующих заряженных частиц на материалы [1–3] в связи с созданием ускорителей и накопительных колец тяжелых ионов высоких энергий в ряде стран, а также с проблемой определения радиационной стойкости конструкционных материалов, которые предполагается использовать, в том числе и в термоядерных реакторах, становятся актуальными. 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 $\text{Ar}(90\%) - \text{O}_2(10\%)$ и затем отожженная при высоком вакууме и температуре 350°C в течение длительного времени (до 24 часов), 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 (см., например, [5, 6]). Отметим, что треком тяжелой заряженной частицы принято называть сильно деформированную 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 имеет не только большое значение для понимания основных закономерностей этих процессов, но также важно и 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 для вычисления температур электронов и решетки. 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 авторы пренебрегли зависимостью 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]).

Заметим, что характерное время достижения электронами равновесного распределения составляет $(1–5) \cdot 10^{-15}$ с [7, 33–35], а время выравнивания тем-

пературы электронов и решетки — $(1-5) \cdot 10^{-13}$ с [7, 33, 34]. Поэтому учет влияния температуры на удельную теплоемкость и теплопроводность при численном решении уравнений теплопроводности вызывает закономерный вопрос: возможны ли заметные изменения этих параметров за столь короткие времена для неравновесной системы или нет.

Целью настоящей работы является численное исследование уравнений теплопроводности в цилиндрической геометрии для «нагретого» электронного газа [37] и решетки при постоянных значениях теплоемкости и теплопроводности.

1. ЛИНЕЙНАЯ СИСТЕМА УРАВНЕНИЙ С НАЧАЛЬНЫМИ И ГРАНИЧНЫМИ УСЛОВИЯМИ ДЛЯ ВЫЧИСЛЕНИЯ ТЕМПЕРАТУРНЫХ ЭФФЕКТОВ В МОДЕЛИ ТЕРМИЧЕСКОГО ПИКА

Система связанных уравнений в частных производных в цилиндрической системе координат записывается без учета зависимости удельной теплоемкости и теплопроводности от температуры, а следовательно и от координаты r (расстояние от траектории иона), и от координаты глубины z в мишени:

$$C_e(T_0) \frac{\partial T_e}{\partial t} = \lambda_e(T_0) \left\{ \frac{1}{r} \frac{\partial T_e}{\partial r} + \frac{\partial^2 T_e}{\partial r^2} + \frac{\partial^2 T_e}{\partial z^2} \right\} - g(T_0)(T_e - T_i) + A(r, z, t), \quad (1)$$

$$C_i(T_0) \frac{\partial T_i}{\partial t} = \lambda_i^{\parallel}(T_0) \left\{ \frac{1}{r} \frac{\partial T_i}{\partial r} + \frac{\partial^2 T_i}{\partial r^2} \right\} + \lambda_i^{\perp}(T_0) \frac{\partial^2 T_i}{\partial z^2} + g(T_0)(T_e - T_i). \quad (2)$$

Ось z направлена перпендикулярно облучаемой поверхности мишени, то есть 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, в общем случае зависящие от температуры. В рассматриваемом варианте эти константы не зависят 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 — константа электрон-фононного взаимодействия. В общем случае функция $A(r, z, t)$ — объемная плотность вносимой ионом мощности. Она может быть представлена в виде наиболее часто используемого выражения [33–35, 37]:

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

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

$$\mu(z) = S_{\text{inel}}(z)/S_{\text{inel}0}, \quad S_{\text{inel}0} = S_{\text{inel}}(z = 0), \quad S_{\text{inel}} = dE/dz. \quad (4)$$

Время достижения электронами равновесного распределения (то есть 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 высоковозбужденной 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]. Отсюда после интегрирования имеем выражение для нормировочного множителя:

$$b = \{(2\pi)^{3/2} 0,84134 r_0^2 t_0 [1 - \exp(-r_m/r_0) \cdot (1 + r_m/r_0)]\}^{-1}. \quad (6)$$

Тогда при $r_m/r_0 \gg 1$ упрощенное выражение записывается в форме

$$b = \{(2\pi)^{3/2} 0,84134 r_0^2 t_0\}^{-1}.$$

Из условия ограниченности решений уравнений (температур электронов и решетки) и их равенства исходной температуре на достаточном удалении от траектории по радиусу ($r = R_{\text{max}}$) и по глубине ($z = Z_{\text{max}}$) можем написать начальные условия (см., например, [4, 6]):

$$T_{e,i}(r, z, 0) = T_0 = 300 \text{ K}, \quad (7)$$

а граничные условия запишем в виде

$$\left. \frac{\partial T_{e,i}(r, z, t)}{\partial r} \right|_{r=0} = 0, \quad \left. \frac{\partial T_{e,i}(r, z, t)}{\partial z} \right|_{z=0} = 0, \quad (8)$$

$$T_{e,i}(R_{\text{max}}, z, t) = T_{e,i}(r, Z_{\text{max}}, t) = T_0. \quad (9)$$

Здесь и далее R_{max} — минимальный радиус удаления от траектории иона, а Z_{max} — минимальная 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: $\check{T}_e = T_e/T_0$, $\check{T}_i = T_i/T_0$, $\check{r} = r/\Delta r$, $\check{z} = z/\Delta z$, $\check{t} = t/\Delta t$, где Δr , Δz и Δt — 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 α_1, α_2 — произвольные безразмерные константы. Значения этих констант положим равными: $\alpha_1 = \alpha_2 = 100$. Тогда систему уравнений (1), (2) можно записать в виде (верхние значки над безразмерными величинами опущены):

$$\frac{\partial T_e}{\partial t} = k_e \left\{ \frac{1}{r} \frac{\partial T_e}{\partial r} + \frac{\partial^2 T_e}{\partial r^2} + \frac{\partial^2 T_e}{\partial z^2} \right\} - g_e(T_e - T_i) + A(r, z, t), \quad (10)$$

$$\frac{\partial T_i}{\partial t} = k_i^{\parallel} \left\{ \frac{1}{r} \frac{\partial T_i}{\partial r} + \frac{\partial^2 T_i}{\partial r^2} \right\} + k_i^{\perp} \frac{\partial^2 T_i}{\partial z^2} + g_i(T_e - T_i), \quad (11)$$

где $k_\beta = \lambda_\beta(T_0)\alpha_1 t_0/[C_\beta(\alpha_2 t_0)^2]$, $g_\beta = g\alpha_1 t_0/C_\beta$, а индекс $\beta = e, i$.

В случае, если в кристалле нет анизотропии, $k_i^{\parallel} = k_i^{\perp} = k_i$ и уравнение (11) упрощается. Начальные и граничные условия (7)–(9) тогда записываются в виде

$$T_\beta(r, z, 0) = 1; \quad \frac{\partial T_\beta}{\partial r} \Big|_{r=0} = 0; \quad \frac{\partial T_\beta}{\partial z} \Big|_{z=0} = 0; \quad (12)$$

$$T_\beta(R_{\max}, z, t) = 1; \quad T_\beta(r, Z_{\max}, t) = 1. \quad (13)$$

Безразмерная объемная плотность мощности $A(r, z, t)$ в уравнении (10) определяется формулой

$$A(r, z, t) = A_0 \exp(-\alpha_2 r) \exp[-\alpha_1^2(t - 0,05)^2/2] \mu(z), \quad (14)$$

здесь $A_0 = b S_{inel0} \alpha_1 t_0 / (C_e T_0)$.

Отметим, что в записи выражения $A(r, z, t)$ в виде (14) 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 (14) — $\exp[-(t - 5t_0)^2/(2t_0^2)]$. 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 делает ситуацию с временной зависимостью более реалистичной.

Параметры модели C_e , C_i , g , λ_e , λ_i , $S_e(0)$ были взяты при комнатной температуре $T = 300 \text{ K}$ для никеля и имеют следующие значения: $C_e = 2,733 \cdot 10^{-2} \text{ Дж}/(\text{см}^3 \cdot \text{K})$, $C_i = 3,91 \text{ Дж}/(\text{см}^3 \cdot \text{K})$, $g = 4,05 \cdot 10^{12} \text{ Вт}/(\text{см}^3 \cdot \text{K})$,

$\lambda_e = 4,1 \text{Вт}/(\text{см} \cdot \text{К})$, $\lambda_i = 0,91 \text{Вт}/(\text{см} \cdot \text{К})$, $S_e(0) = 1,157 \cdot 10^{-7} \text{Дж}/\text{см}$. Для приведенных величин безразмерные параметры $k_e, k_i, g_e, g_i, A_0, R_{\max}, Z_{\max}$ принимают значения: $k_e \simeq 0,15$; $k_i \simeq 2,33 \cdot 10^{-4}$; $g_e \simeq 14,82$; $g_i \simeq 0,1036$; $A_0 \simeq 8,97 \cdot 10^6$; $R_{\max} = 0,2$; $Z_{\max} = 200$.

Таким образом, для численного решения линейной системы уравнений (10), (11) с начальными и граничными условиями (12), (13) все параметры известны и заданы для случая прохождения иона урана с энергией 700 МэВ в никеле (см. [7]). 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.

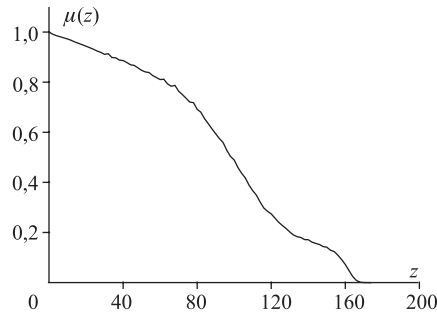


Рис. 1. Зависимость нормированных на максимальное значение ($S_{\text{inel}0}$) удельных ионизационных потерь энергии $\mu(z)$ ионов урана в никеле от безразмерной глубины пробега

2. МЕТОД ЧИСЛЕННОГО РЕШЕНИЯ

Введем равномерную сетку по переменным в уравнениях (10), (11), то есть 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 температуру электронной подсистемы и температуру решетки обозначим через \bar{T} и T соответственно. Тогда значения функций \bar{T} и T в узлах (r_i, z_j, t_k) обозначим символами $\bar{T}_{i,j}^k$ и $T_{i,j}^k$.

Для решения системы уравнений (10)–(14) будем использовать следующую двухслойную явную конечно-разностную схему порядка аппроксимации

$O(h_t + h_r^2 + h_z^2)$ [38–40]:

$$\begin{aligned} \frac{\bar{T}_{i,j}^{k+1} - \bar{T}_{i,j}^k}{h_t} = & k_e \left\{ \frac{\bar{T}_{i+1,j}^k - 2\bar{T}_{i,j}^k + \bar{T}_{i-1,j}^k}{h_r^2} + \frac{1}{r} \frac{\bar{T}_{i+1,j}^k - \bar{T}_{i-1,j}^k}{2h_r} + \frac{\bar{T}_{i,j+1}^k - 2\bar{T}_{i,j}^k + \bar{T}_{i,j-1}^k}{h_z^2} \right\} - \\ & - g_e(\bar{T}_{i,j}^k - T_{i,j}^k) + A_{i,j}^k; \\ \frac{4\bar{T}_{1,j}^{k+1} - \bar{T}_{2,j}^{k+1} - 3\bar{T}_{0,j}^{k+1}}{2h_r} = & 0; \quad \frac{4\bar{T}_{i,1}^{k+1} - \bar{T}_{i,2}^{k+1} - 3\bar{T}_{i,0}^{k+1}}{2h_z} = 0; \quad (15) \end{aligned}$$

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

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

$$k_{e,i} h_t (1/h_r^2 + 1/h_z^2) \leq 1/2. \quad (17)$$

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 мы эту функцию предварительно сглаживаем и интерполируем кубическим сплайном.

Для проверки точности схемы (15)–(17) проводился численный эксперимент при фиксированных шагах h_r , h_t и на сгущающейся сетке по z , т.е. h_z ,

$h_z/2, h_z/4$ ($h_r = 10^{-3}, h_z = 4 \cdot 10^{-2}, h_t = 3 \cdot 10^{-6}$). Получены следующие результаты:

$$\max_{0 \leq t \leq 1,2} \left| \frac{T_{h_z}^e(0,0,t) - T_{h_z/2}^e(0,0,t)}{(T_{h_z}^e(0,0,t) + T_{h_z/2}^e(0,0,t))/2} \right| \simeq 5,5 \cdot 10^{-6} \text{ при } t \simeq 0,21;$$

$$\max_{0 \leq t \leq 1,2} \left| \frac{T_{h_z/2}^e(0,0,t) - T_{h_z/4}^e(0,0,t)}{(T_{h_z/2}^e(0,0,t) + T_{h_z/4}^e(0,0,t))/2} \right| \simeq 2,5 \cdot 10^{-6} \text{ при } t \simeq 0,21;$$

$$\max_{0 \leq t \leq 1,2} \left| \frac{T_{h_z}^i(0,0,t) - T_{h_z/2}^i(0,0,t)}{(T_{h_z}^i(0,0,t) + T_{h_z/2}^i(0,0,t))/2} \right| \simeq 4,5 \cdot 10^{-6} \text{ при } t \simeq 0,05;$$

$$\max_{0 \leq t \leq 1,2} \left| \frac{T_{h_z/2}^i(0,0,t) - T_{h_z/4}^i(0,0,t)}{(T_{h_z/2}^i(0,0,t) + T_{h_z/4}^i(0,0,t))/2} \right| \simeq 1,6 \cdot 10^{-6} \text{ при } t \simeq 0,05.$$

Как видно, найденные относительные разности профилей температур на сгущающейся сетке уменьшаются. При решении системы уравнений невязка получилась равной $\delta \simeq 10^{-6}$.

3. ЧИСЛЕННЫЙ АНАЛИЗ И ОБСУЖДЕНИЕ ЕГО РЕЗУЛЬТАТОВ

С использованием уравнений (10)–(13) проанализированы временные и координатные зависимости температур электронного газа T_e и решетки T_i . На рис. 2 представлены зависимости от времени температуры электронного

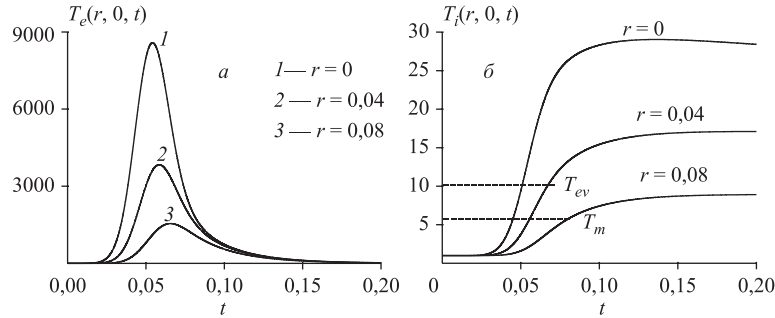


Рис. 2. Зависимости от времени температуры электронного газа (а) и решетки (б) на поверхности (при $z = 0$) облучаемого ионами урана никеля для различных расстояний от траектории. Штриховыми прямыми на рис. 2, б выделены температуры плавления T_{melt} и испарения T_{evap}

газа (рис. 2, а) и решетки (рис. 2, б) на поверхности образца никеля, облучаемого ионами урана, на различных расстояниях от траектории иона $r =$

0; 0,04; 0,08. Видно, что при всех выбранных значениях радиуса r температура решетки превышает температуру плавления T_{melt} никеля, а при $r < 0,8$ и температуру испарения $T > T_{\text{evap}}$. Следовательно, при достижении решеткой температуры, превышающей $T_{\text{melt}} = 5,76$, $T_{\text{evap}} = 10,6$, необходимо решать систему уравнений для теплопроводностей с учетом фазовых переходов. На рис. 3 представлены зависимости от времени температуры электронного газа

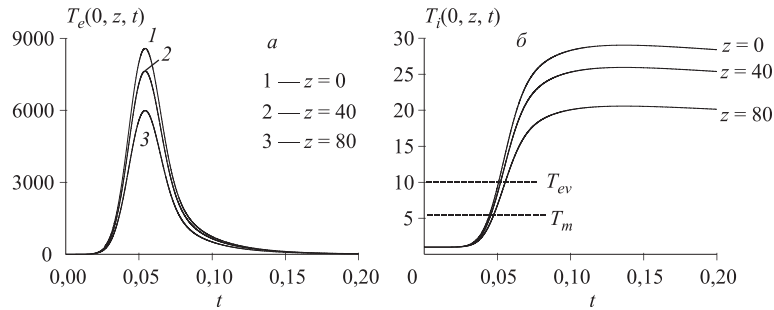


Рис. 3. Зависимости от времени температуры электронного газа (а) и решетки (б) на траектории прохождения иона урана через поверхность ($r = 0$) для разных глубин z в мишени. Штриховыми прямыми на рис. 3 выделены температуры плавления T_{melt} и испарения T_{evap}

(а) и решетки (б) на траектории прохождения иона урана через образец никеля (то есть при $r = 0$) для разных глубин в мишени $z = 0; 40; 80$. Видно, что, как и на рис. 2, при приведенных значениях z температура решетки превышает температуры плавления и испарения $T_{\text{melt}}, T_{\text{evap}}$ (рис. 3, б). Кроме того, при увеличении времени $t > 0,1$ температура вдоль траектории иона начинает уменьшаться, то есть должны происходить процессы рекристаллизации расплавленной области. На рис. 4 приведены зависимости электронной

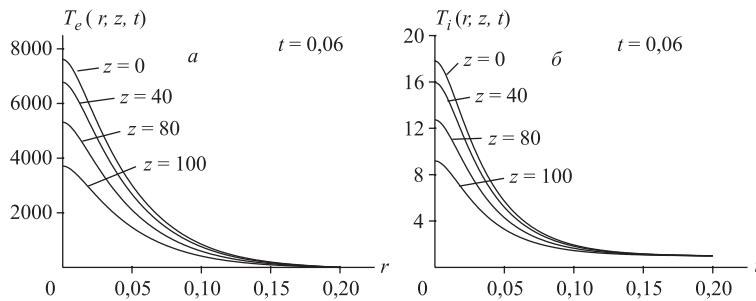


Рис. 4. Радиальные профили температур электронного газа (а) и кристаллической решетки (б) на разных глубинах от плоскости $z = 0$ ($z = 0; 40; 80; 100$) в момент времени $t = 0,06$

(а) и решеточной (б) температур по радиусу r от траектории иона урана при различных глубинах в мишени: $z = 0; 40; 80; 100$ при значении времени $t = 0,06$. На рис. 5 представлены зависимости электронной (а) и реше-

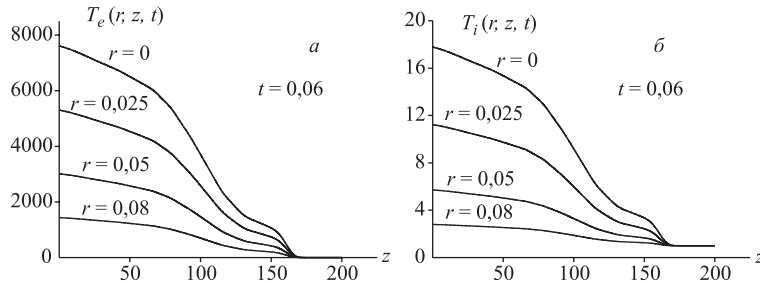


Рис. 5. Профили температур электронного газа (а) и кристаллической решетки (б) вдоль трека иона на разных расстояниях от оси трека ($r = 0; 0,025; 0,05; 0,08$) в момент времени $t = 0,06$

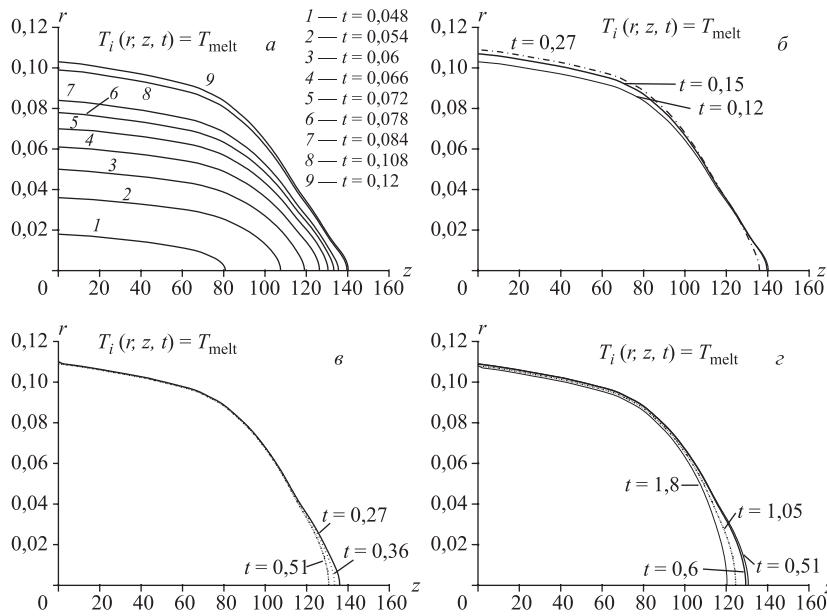


Рис. 6. Динамика изменения линий уровня температуры плавления кристаллической решетки со временем

точной (б) температур по глубине z в мишени при различных расстояниях от траектории иона урана $r = 0; 0,025; 0,05; 0,08$ при значении времени

$t = 0,06$. Заметим, что вид зависимостей электронной и решеточной температур от радиуса r и глубины z напоминает координатные зависимости удельных ионизационных потерь энергии.

Хотя мы не решали задачу Стефана (плавление и затвердевание) вокруг трека иона, тем не менее есть возможность предсказать форму и максимальный размер области, внутри которой происходит испарение и плавление. На рис. 6 приведены на плоскости (z, r) линии уровней температуры плавления в разные моменты времени. Поверхности, на которых температура решетки равна температуре плавления, получают при вращении этих линий вокруг оси z . Как видно, поверхность уровня температуры плавления расширяется и достигает максимального размера в момент времени $t \simeq 0,12$ (рис. 6, *a*). Вне этой области температура меньше температуры плавления, поэтому эта область является областью максимального размера, внутри которой происходит испарение и плавление металла. Дальше данная область по направлению r продолжает незначительно расширяться, в то время как по направлению z она начинает уменьшаться (рис. 6, *б*). Это означает, что затвердевание происходит в направлении z раньше, чем в направлении r . Расширение уровней поверхности температуры плавления продолжается до момента $t = 0,27$, а потом стабилизируется (рис. 6, *в*).

Дальше происходит уменьшение размера области под данной поверхностью, т. е. затвердевание образца происходит по всем направлениям (рис. 6, *г*). При этом максимальный диаметр и максимальная глубина проплава равны $D_{\max}^m \simeq 0,23$, $Z_{\max}^m \simeq 140$ ($D_{\max}^m \simeq 230 \text{ \AA}^0$, $Z_{\max}^m \simeq 1,4 \cdot 10^5 \text{ \AA}^0$).

На рис. 7 приведены аналогичные зависимости для линий уровня тем-

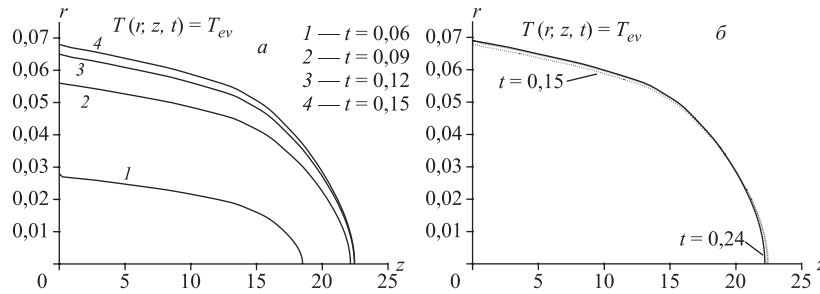


Рис. 7. Динамика изменений линий уровня температуры испарения кристаллической решетки со временем

пературы, равной температуре испарения. Как видно, область внутри этой поверхности имеет размеры $D_{\max}^{ev} \simeq 0,14$, $Z_{\max}^{ev} \simeq 22,5$ ($D_{\max}^{ev} \simeq 140 \text{ \AA}^0$, $Z_{\max}^{ev} \simeq 22,5 \cdot 10^3 \text{ \AA}^0$). Формы областей плавления и испарения имеют вид цилиндрических параболоидов.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

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

1. В случае облучения никелевой мишени ионами урана с энергией 700 МэВ и значением удельных ионизационных потерь энергии $S_{\text{inel}} = 73$ кэВ/нм могут происходить процессы, обусловленные фазовыми переходами: твердое тело — жидкость (плавление никеля) и твердое тело — парообразное состояние (испарение никеля) — с последующим затвердеванием материала мишени при охлаждении и диссипацией тепла, выделенного ионом урана.

2. Полученные результаты позволяют выделить характерные размеры областей с фазовыми переходами. Для получения уточненных численных результатов необходимо решить соответствующие уравнения теплопроводности с учетом фазовых переходов (см. [36, 37]), что и будет сделано в дальнейшем.

3. Поверхность уровня температуры, равной температуре плавления, которая имеет вид цилиндрического параболоида, достигает максимального размера $D_{\text{max}}^m \simeq 0,23$, $Z_{\text{max}}^m \simeq 140$ ($D_{\text{max}}^m \simeq 230 \text{ \AA}^0$, $Z_{\text{max}}^m \simeq 140 \cdot 10^3 \text{ \AA}^0$). Процессы плавления, затвердевания и испарения происходят внутри этой области. Аналогичная поверхность для температуры испарения имеет размеры $D_{\text{max}}^{\text{ev}} \simeq 0,14$, $Z_{\text{max}}^{\text{ev}} \simeq 22,5$ ($D_{\text{max}}^{\text{ev}} \simeq 140 \text{ \AA}^0$, $Z_{\text{max}}^{\text{ev}} \simeq 22,5 \cdot 10^3 \text{ \AA}^0$).

4. При решении задачи (10)–(13) по мере уменьшения температуры в электронной системе и увеличения температуры решетки слагаемое $g(T_e - T_i)$ меняет знак (например, $T_e = T_i$ для точки $r = 0$, $z = 0$ наступит при $t \simeq 0,24$ ($t \simeq 2,4 \cdot 10^{-14}$ с)), то есть происходит нагревание остывшей электронной подсистемы за счет решетки.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, гранты № 03-01-00657 и № 02-01-00606.

ЛИТЕРАТУРА

1. Lesueur D. Amorphisation par irradiation aux flagmats de fission d'un alliage Pd-Si // *Radiat. Effects*. 1975. V. 24, № 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, 18th-22nd 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, № 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 sensitivity of metals under irradiation swift-heavy-ion irradiation: a transient thermal process // *J. Phys.: Condens. Matter.* 1994. V. 6, № 34. P. 6733–6750.
8. *Toulemonde M.* Nanometric phase transformation of oxide materials under GeV energy heavy ion irradiation // *Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. B.* 1999. V. 156, № 1–4. P. 1–11.
9. *Neumann R.* Scanning probe microscopy of ion-irradiated materials // *Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. B.* 1999. V. 151, № 1–4. P. 42–55.
10. *Furuno S. et al.* Tracks of high energy heavy ions in solids // *Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. B.* 1996. V. 107, № 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, № 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, № 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. and Meth. in Phys. Res. B.* 1989. V. 43, № 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, № 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. and Meth. in Phys. Res. 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. and Meth. in Phys. Res. 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. and Meth. in Phys. Res. B.* 1998. V. 146, № 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, № 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. *И. М. Лифшиц.* О температурных всплесках 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., Калинин А. И.* Механические эффекты вблизи ионных треков и термических пиков // *Вопросы атомной науки и техники. Сер.: Физика радиационных повреждений и радиационное материаловедение.* Москва, 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*, V. 49, Suppl. 1, 2004. P. S118–S123
29. *Амирханов И. В., Земляная Е. В., Пузынин И. В., Пузынина Т. П., Сархадов И.* Численное моделирование фазовых переходов в металлах, облучаемых импульсными ионными пучками. // *Сообщение ОИЯИ Р11-2001-164.* Дубна, ОИЯИ, 14 стр.
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. 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.* // In: *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., Sundqvist B.U.R.* On model of fullerene formation from polymer under MeV ion impact // *Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. 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.* 2003. Дубна, ОИЯИ, С. 34.
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.

Получено 22 октября 2004 г.

Редактор *М. И. Зарубина*

Подписано в печать 13.01.2005.

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

Усл. печ. л. 0,94. Уч.-изд. л. 1,17. Тираж 330 экз. Заказ № 54729.

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/