

P11-2005-146

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 ДВУХСЛОЙНЫХ МАТЕРИАЛАХ ПРИ  
ОБЛУЧЕНИИ ИХ ТЯЖЕЛЫМИ ИОНАМИ ВЫСОКИХ  
ЭНЕРГИЙ В РАМКАХ МОДЕЛИ ТЕРМИЧЕСКОГО  
ПИКА С ПОСТОЯННЫМИ ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИМИ  
ПАРАМЕТРАМИ

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

Амирханов И. В. и др.

P11-2005-146

Исследование тепловых процессов в двухслойных материалах при облучении их тяжелыми ионами высоких энергий в рамках модели термического пика с постоянными теплофизическими параметрами

Система уравнений для температуры электронного газа и решетки вокруг и вдоль траектории тяжелого иона висмута  $^{209}\text{Bi}$  с энергией 710 МэВ в двухслойном материале Ni(2 мкм)/W при постоянных теплофизических параметрах 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 висмута в материале мишени достаточны для плавления. Оценены размеры областей с максимальным радиусом и глубиной в материале мишени, где могут происходить фазовые переходы.

Работа выполнена в Лаборатории информационных технологий ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна, 2005

Amirkhanov I. V. et al.

P11-2005-146

Investigation of Thermal Processes in Two-Layer Materials Exposed to High-Energy Heavy Ions in the Framework of a Thermal Peak Model with Constant Thermal Parameters

A system of equations for temperatures of electronic gas and lattice around and along a trajectory of a 710-MeV heavy ion of bismuth  $^{209}\text{Bi}$  in a two-layer material Ni(2  $\mu\text{m}$ )/W at constant thermal parameters is solved numerically in an axial-symmetric cylindrical system of coordinates. On the basis of the obtained dependences of lattice temperature on radius around the ion trajectory and depth, one can make a conclusion that the ionization energy losses of bismuth ion in the target material are sufficient for melting. The sizes of regions with maximum radius and depth in the target material, where the phase transformations can take place, are estimated.

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

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

## ВВЕДЕНИЕ

В последние годы значительные усилия были направлены на создание наноструктур (материалов с заранее заданными свойствами), представляющих собой достаточно тонкое (порядка нескольких микрометров) покрытие, нанесенное на материал подложки [1–4]. Такая структура в ряде случаев позволяет улучшить антикоррозионные, теплофизические и электрофизические свойства, а также повысить износостойкость изделий из двухслойных материалов при сохранении механических свойств, присущих подложке. Часто такие материалы не смешиваются один с другим [2, 3]. В ряде работ для увеличения взаимного перемешивания компонентов вблизи границы раздела используется облучение тяжелыми ионами с высокими удельными ионизационными потерями энергии и пробегами, заведомо превышающими толщину нанесенного покрытия. Интерес к изучению таких процессов обусловлен особенностями радиационных изменений в материалах, которые не только имеют 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 [5–17] для исследования тепловых процессов в двухслойных материалах при постоянных теплофизических параметрах в случае облучения их ионами высоких энергий, а именно, для мишени вольфрама, покрытого слоем никеля толщиной 2 мкм (Ni(2 мкм)/W), при облучении тяжелыми ионами висмута  $^{209}\text{Bi}$  с энергией 710 МэВ.

## 1. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Основными механизмами процессов образования треков тяжелых ионов в диэлектрических материалах являются модели кулоновского взрыва и термического пика [7, 8]. Помимо этого, модель термического пика была эффективно использована для объяснения процессов неупругого распыления мелкодисперсных материалов [9–12]. Треком тяжелой заряженной частицы принято называть сильно деструктурированную область вокруг траектории тяжелого иона в материале, созданную за счет температурных эффектов, вызван-

ных ионизационными потерями энергии  $S_{\text{inel}} = - \left( \frac{\partial E}{\partial z} \right)_{\text{inel}}$  и приводящих к расплавлению и последующей возможной частичной рекристаллизации или аморфизации этой области.

В работах [16–19] была введена система двух связанных уравнений в частных производных для температур электронов  $T_e(r, t)$  и решетки  $T_i(r, t)$ . Данная система уравнений в настоящее время достаточно широко применяется для численных вычислений и оценок температуры решетки в «треке» тяжелого иона [5, 6, 20–22]. С учетом аксиальной симметрии система уравнений для определения решеточной и электронной температур в цилиндрической системе координат в обоих слоях может быть записана в виде [4–6, 16–19, 21]

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

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

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

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

Начальные условия:

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

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

Граничные условия:

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

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

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

а) идеальный контакт:

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

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

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

б) неидеальный контакт:

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

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

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

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

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

На рис. 1 приведена зависимость удельных ионизационных потерь энергии  $S_{\text{inel}}(z)$  ионов  $^{209}\text{Bi}$  с энергией 710 МэВ от глубины в двухслойной струк-

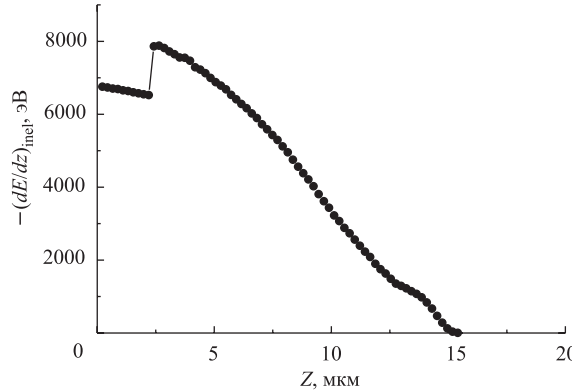


Рис. 1. Зависимость удельных ионизационных потерь энергии  $S_{\text{inel}}(z) = -\left(\frac{\partial E}{\partial z}\right)_{\text{inel}}$  ионов висмута  $^{209}\text{Bi}$  с энергией 710 МэВ от глубины в двухслойной структуре Ni(2 мкм)/W

туре Ni(2 мкм)/W. Так как значения ионизационных потерь энергии тяжелого иона в материале покрытия и подложки различаются в пределах, не превышающих, как правило, одного порядка величины, то численные значения величин  $t_{0\nu}$ ,  $\sigma_{t\nu}$  и  $r_{0\nu}$  для  $\nu = 1, 2$  будем считать одинаковыми. Время достижения электронами равновесного распределения  $t_0$ , т. е. время свободного пробега  $\delta$ -электронов со средней энергией  $\varepsilon_e$ ,  $t_0 \approx (1-5) \cdot 10^{-15}$  с. Полуши-

рина распределения по  $t$  принята равной  $\sigma_{t\nu} = t_0$  [25]. Скорость экспоненциального спада, или пространственная ширина высоковозбужденной области  $r_0 \leq 2,5$  нм [24] или же  $r_0 \cong 1$  нм [13].

Нормировочный множитель  $b_\nu$  определяется из условий нормировки

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

здесь  $r_m$  — максимальный пробег  $\delta$ -электронов, зависящий от максимальной энергии  $\varepsilon_m$ , передаваемой отдельному электрону [13, 21, 25]. Таким образом, мы можем решать следующие две задачи: а) задачу с идеальным контактом (1)–(5), б) задачу с неидеальным контактом (1)–(4), (6).

## 2. МЕТОД ЧИСЛЕННОГО РЕШЕНИЯ

При решении системы уравнений (1), (2) с начальным условием (3), граничным условием (4) и условием сопряжения (5) предполагалось, что в кристалле нет анизотропии (т. е.  $\chi_{i,\nu}^{\parallel}(T_{i,\nu}) = \chi_{i,\nu}^{\perp}(T_{i,\nu}) = \chi_{i,\nu}(T_{i,\nu})$ ) и теплофизические параметры модели взяты при комнатной температуре.

Целесообразно ввести безразмерные переменные, а именно:

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

где  $\Delta r$ ,  $\Delta z$  и  $\Delta t$  — 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  $\alpha_1, \alpha_2$  — выбираемые безразмерные константы. Значения этих констант положим равными:  $\alpha_1 = \alpha_2 = 100$ . Тогда систему уравнений (1), (2) можно записать в виде (верхние черты над безразмерными величинами для простоты опущены)

$$\frac{\partial T_{e,\nu}}{\partial t} = k_{e,\nu} \left( \frac{1}{r} \frac{\partial T_{e,\nu}}{\partial r} + \frac{\partial^2 T_{e,\nu}}{\partial r^2} + \frac{\partial^2 T_{e,\nu}}{\partial z^2} \right) - g_\nu (T_{e,\nu} - T_{i,\nu}) + A_\nu(r, z, t), \quad (8)$$

$$\frac{\partial T_{i,\nu}}{\partial t} = k_{i,\nu} \left( \frac{1}{r} \frac{\partial T_{i,\nu}}{\partial r} + \frac{\partial^2 T_{i,\nu}}{\partial r^2} + \frac{\partial^2 T_{i,\nu}}{\partial z^2} \right) + g_\nu (T_{e,\nu} - T_{i,\nu}), \quad (9)$$

где  $k_{\beta,\nu} = \chi_{\beta,\nu}(T_0)\alpha_1 t_0/[C_{\beta,\nu}(\alpha_2 t_0)^2]$ ,  $g_{\beta,\nu} = g_\nu \alpha_1 t_0/C_{\beta,\nu}$ , а индекс  $\beta = e, i$ . Аналогично переписываются условия (3)–(5).

Начальные условия:

$$T_{e,\nu}(r, z, t = 0) = 1, \quad T_{i,\nu}(r, z, t = 0) = 1. \quad (10)$$

Граничные условия:

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial T_{e,\nu}(r, z, t)}{\partial r} \right|_{r=0} = 0, \quad \left. \frac{\partial T_{i,\nu}(r, z, t)}{\partial r} \right|_{r=0} = 0, \quad T_{e,\nu}(r = R_{\max}, z, t) = 1, \\ T_{i,\nu}(r = R_{\max}, z, t) = 1, \quad \text{где } 0 < z < Z_{\max}, 0 < t < t_{\max}; \end{aligned} \quad (11)$$

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

Условия сопряжения на границе раздела двух материалов (идеальный контакт)

$$\begin{aligned} T_{e,1}(r, z = H - 0, t) = T_{e,2}(r, z = H + 0, t), \\ T_{i,1}(r, z = H - 0, t) = T_{i,2}(r, z = H + 0, t), \\ \chi_{e,1}(T_{e,1}) \frac{\partial T_{e,1}(r, z = H - 0, t)}{\partial z} = \chi_{e,2}(T_{e,2}) \frac{\partial T_{e,2}(r, z = H + 0, t)}{\partial z}, \quad (12) \\ \chi_{i,1}(T_{i,1}) \frac{\partial T_{i,1}(r, z = H - 0, t)}{\partial z} = \chi_{i,2}(T_{i,2}) \frac{\partial T_{i,2}(r, z = H + 0, t)}{\partial z}, \end{aligned}$$

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

Безразмерная объемная плотность мощности  $A_\nu(r, z, t)$  в уравнении (8) определяется формулой

$$A_\nu(r, z, t) = A_0 \exp(-\alpha_2 r) \exp(-\alpha_1^2(t - 0,05)^2/2) \mu(z). \quad (13)$$

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

$$\mu(z) = S_{\text{inel}}(z)/S_{\text{inel}}(0).$$

Как и в предыдущей работе [22], введем равномерную сетку  $\{r_i = ih_r (i = 0, \dots, n), z_i = jh_z (j = 0, \dots, m), t_k = kh_t (k = 0, \dots, l)\}$ ;  $h_r, h_z$  и  $h_t$  — соответственно шаги по переменным  $r, z$  и  $t$ . 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 (8)–(12) будем использовать следующую явную двухслойную конечно-разностную схему порядка аппроксимации



$O(h_t + h_r^2 + h_z^2)$  [26]:

$$\begin{aligned} \frac{\bar{T}_{i,j}^{k+1} - \bar{T}_{i,j}^k}{h_t} &= k_{e,1} \left\{ \frac{\bar{T}_{i+1,j}^k - 2\bar{T}_{i,j}^k + \bar{T}_{i-1,j}^k}{h_r^2} + \frac{1}{r} \frac{\bar{T}_{i+1,j}^k - \bar{T}_{i-1,j}^k}{2h_r} + \right. \\ &\quad \left. + \frac{\bar{T}_{i,j+1}^k - 2\bar{T}_{i,j}^k + \bar{T}_{i,j-1}^k}{h_z^2} \right\} - g_{e,1}(\bar{T}_{i,j}^k - T_{i,j}^k) + A_{i,j,1}^k, \\ \frac{T_{i,j}^{k+1} - T_{i,j}^k}{h_t} &= k_{i,1} \left\{ \frac{T_{i+1,j}^k - 2T_{i,j}^k + T_{i-1,j}^k}{h_r^2} + \frac{1}{r} \frac{T_{i+1,j}^k - T_{i-1,j}^k}{2h_r} + \right. \\ &\quad \left. + \frac{T_{i,j+1}^k - 2T_{i,j}^k + T_{i,j-1}^k}{h_z^2} \right\} + g_{i,1}(\bar{T}_{i,j}^k - T_{i,j}^k), \quad (14) \end{aligned}$$

$$i = 1, \dots, n-1, \quad j = 1, \dots, m^* - 1, \quad k = 0, 1, 2, \dots, l;$$

$$\begin{aligned} \frac{\bar{T}_{i,j}^{k+1} - \bar{T}_{i,j}^k}{h_t} &= k_{e,2} \left\{ \frac{\bar{T}_{i+1,j}^k - 2\bar{T}_{i,j}^k + \bar{T}_{i-1,j}^k}{h_r^2} + \frac{1}{r} \frac{\bar{T}_{i+1,j}^k - \bar{T}_{i-1,j}^k}{2h_r} + \right. \\ &\quad \left. + \frac{\bar{T}_{i,j+1}^k - 2\bar{T}_{i,j}^k + \bar{T}_{i,j-1}^k}{h_z^2} \right\} - g_{e,2}(\bar{T}_{i,j}^k - T_{i,j}^k) + A_{i,j,2}^k, \\ \frac{T_{i,j}^{k+1} - T_{i,j}^k}{h_t} &= k_{i,2} \left\{ \frac{T_{i+1,j}^k - 2T_{i,j}^k + T_{i-1,j}^k}{h_r^2} + \frac{1}{r} \frac{T_{i+1,j}^k - T_{i-1,j}^k}{2h_r} + \right. \\ &\quad \left. + \frac{T_{i,j+1}^k - 2T_{i,j}^k + T_{i,j-1}^k}{h_z^2} \right\} + g_{i,2}(\bar{T}_{i,j}^k - T_{i,j}^k), \quad (15) \end{aligned}$$

$$i = 1, \dots, n-1, \quad j = m^* + 1, \dots, m-1, \quad k = 0, 1, 2, \dots, l;$$

$$\bar{T}_{i,j}^0 = T_{i,j}^0 = 1; \quad \bar{T}_{m,j}^{k+1} = T_{m,j}^{k+1} = 1; \quad \bar{T}_{i,n}^{k+1} = T_{i,n}^{k+1} = 1,$$

$$\frac{4\bar{T}_{1,j}^{k+1} - \bar{T}_{2,j}^{k+1} - 3\bar{T}_{0,j}^{k+1}}{2h_r} = 0, \quad \frac{4\bar{T}_{i,1}^{k+1} - \bar{T}_{i,2}^{k+1} - 3\bar{T}_{i,0}^{k+1}}{2h_z} = 0,$$

$$\frac{4T_{1,j}^{k+1} - T_{2,j}^{k+1} - 3T_{0,j}^{k+1}}{2h_r} = 0, \quad \frac{4T_{i,1}^{k+1} - T_{i,2}^{k+1} - 3T_{i,0}^{k+1}}{2h_z} = 0, \quad (16)$$

$$i = 1, 2, \dots, n-1; \quad j = 1, 2, \dots, m-1; \quad k = 0, 1, 2, \dots, l,$$

$$\chi_{e,1} \frac{\bar{T}_{i,m^*-2}^{k+1} - 4\bar{T}_{i,m^*-1}^{k+1} + 3\bar{T}_{i,m^*}^{k+1}}{2h_z} = \chi_{e,2} \frac{-3\bar{T}_{i,m^*}^{k+1} + 4\bar{T}_{i,m^*+1}^{k+1} - \bar{T}_{i,m^*+2}^{k+1}}{2h_z},$$

$$\chi_{i,1} \frac{T_{i,m^*-2}^{k+1} - 4T_{i,m^*-1}^{k+1} + 3T_{i,m^*}^{k+1}}{2h_z} = \chi_{i,2} \frac{-3T_{i,m^*}^{k+1} + 4T_{i,m^*+1}^{k+1} - T_{i,m^*+2}^{k+1}}{2h_z}, \quad (17)$$

$$i = 1, 2, \dots, n-1; \quad k = 0, 1, \dots, l.$$

При вычислении по данной схеме шаг по времени  $h_t$  выбирается из условия устойчивости схемы [26]:

$$\max(k_{e,i,\nu}) h_t \left( \frac{1}{h_r^2} + \frac{1}{h_z^2} \right) \leq \frac{1}{2}. \quad (18)$$

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

Для проверки сходимости схемы (14)–(18) проводился численный эксперимент при фиксированных шагах  $h_r$ ,  $h_t$  и на сгущающейся сетке по  $z$ , т.е.  $h_z$ ,  $h_z/2$ ,  $h_z/4$  ( $h_r = 2 \cdot 10^{-3}$ ,  $h_z = 5 \cdot 10^{-2}$ ,  $h_t = 10^{-5}$ ). Приведем результаты численного эксперимента в точке  $r = 0$ ,  $z = 0$ :

$$\max_{0 \leq t \leq 2} \left| \frac{\bar{T}_{h_z}(0, 0, t) - \bar{T}_{h_z/2}(0, 0, t)}{(\bar{T}_{h_z}(0, 0, t) + \bar{T}_{h_z/2}(0, 0, t))/2} \right| \simeq 6,3 \cdot 10^{-5} \quad \text{при } t \simeq 0,05,$$

$$\max_{0 \leq t \leq 2} \left| \frac{\bar{T}_{h_z/2}(0, 0, t) - \bar{T}_{h_z/4}(0, 0, t)}{(\bar{T}_{h_z/2}(0, 0, t) + \bar{T}_{h_z/4}(0, 0, t))/2} \right| \simeq 2,8 \cdot 10^{-5} \quad \text{при } t \simeq 0,05,$$

$$\max_{0 \leq t \leq 2} \left| \frac{T_{h_z}(0, 0, t) - T_{h_z/2}(0, 0, t)}{(T_{h_z}(0, 0, t) + T_{h_z/2}(0, 0, t))/2} \right| \simeq 5,7 \cdot 10^{-5} \quad \text{при } t \simeq 0,22,$$

$$\max_{0 \leq t \leq 2} \left| \frac{\bar{T}_{h_z/2}(0, 0, t) - \bar{T}_{h_z/4}(0, 0, t)}{(\bar{T}_{h_z/2}(0, 0, t) + \bar{T}_{h_z/4}(0, 0, t))/2} \right| \simeq 1,9 \cdot 10^{-5} \quad \text{при } t \simeq 0,22.$$

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

### 3. ОБСУЖДЕНИЕ ПОЛУЧЕННЫХ РЕЗУЛЬТАТОВ

С использованием системы уравнений (8), (9) с начальными условиями (3), граничным условием (4) и условием сопряжения (5) были проанализированы временные и координатные зависимости температур электронного газа  $T_{e,\nu}(r, z, t)$  и решетки  $T_{i,\nu}(r, z, t)$  для двухслойных материалов.

На рис. 2 представлены зависимости электронных и решеточных температур в слоях Ni и W в двухслойной структуре вдоль проективного пробега иона от глубины  $z$  в двухслойной мишени Ni(2 мкм)/W для двух моментов времени  $t_1 = 3 \cdot 10^{-15}$  с,  $t_2 = 6 \cdot 10^{-15}$  с и при четырех расстояниях от оси

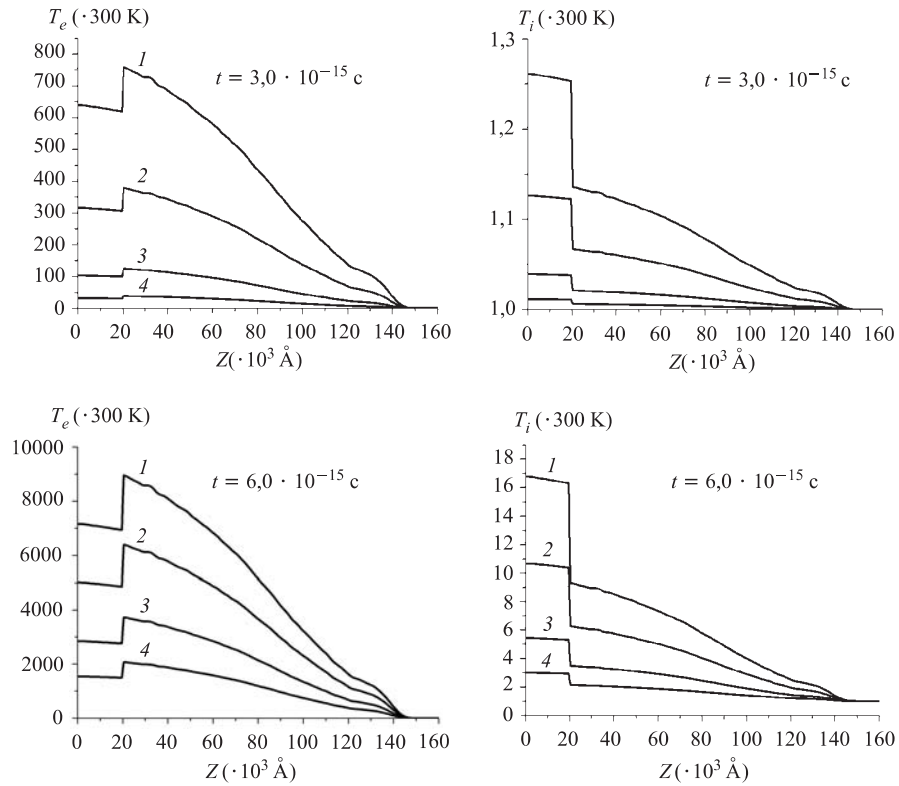


Рис. 2. Зависимости электронных и решеточных температур в слоях от глубины  $z$  (глубина раздела слоев  $H = 20 \cdot 10^3 \text{ \AA}$ )

трека  $r = 0; 25; 50$  и  $75 \text{ \AA}$  соответственно, кривые 1–4. Видно, что зависимость электронной температуры от глубины в двухслойной мишени напоминает профиль удельных ионизационных потерь энергии тяжелого иона (см. рис. 2). В то же время решеточная температура  $T_i$  в слое Ni превышает температуры в подложке и растет более быстро из-за соотношений коэффициентов, характеризующих тепловые процессы. Следует отметить, что уже при времени  $t_2 = 6 \cdot 10^{-15}$  с температура в слое Ni превышает температуру плавления  $T_{\text{melt, Ni}} = 5,75 \cdot 300 \text{ K}$ . На рис. 3 представлены зависимости от времени температуры электронного газа и решетки на различных расстояниях от

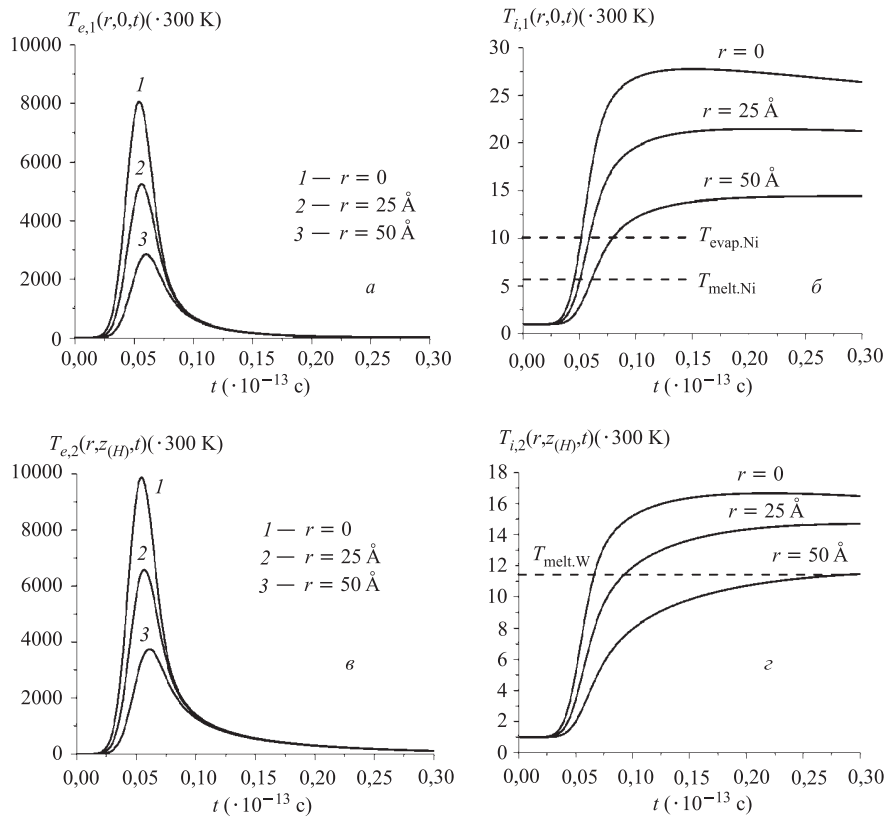


Рис. 3. Зависимости от времени температуры электронного газа (а) и решетки (б) на поверхности образца первого слоя никеля и второго слоя вольфрама (в, з) на различных расстояниях  $r$  от траектории ( $H = 2 \cdot 10^4 \text{ \AA}$ )

траектории  $r = 0; 25; 50 \text{ \AA}$ . Видно, что при всех выбранных значениях радиуса  $r$  температура решетки никеля и температура решетки вольфрама при определенных временах может превышать как температуру плавления  $T_{\text{melt,Ni}}$  никеля, так и  $T_{\text{melt,W}} = 11,3 \cdot 300 \text{ K}$  вольфрама.

### ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе на основе модели термического пика получены результаты численного исследования температур электронного газа и кристаллической решетки в двухслойных материалах Ni(2 мкм)/W при облучении ионами висмута

$^{209}\text{Bi}$  с энергией 710 МэВ. Выполнен численный анализ сходимости явной схемы вычислений. По результатам вычислительных экспериментов можно сделать следующие выводы.

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

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

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

## ЛИТЕРАТУРА

1. *Leguay R. et al.* // Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. B. 1995. V. 106. P. 28–33.
2. *Bolse W., Schattat B.* // Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. B. 2002. V. 190. P. 173–176.
3. *Bolse W.* // Surf. and Coating Techn. 2002. V. 158–159. P. 1–7.
4. *Wang Z. G. et al.* // J. Phys.: Condens. Matter. 1994. V. 6, No. 34. P. 6733–6750.
5. *Dufour C. et al.* // J. Phys.: Condens. Matter. 1993. V. 5, No. 26. P. 4573–4584.
6. *Audouard A. et al.* // J. Phys: Condens. Matter. 1993. V. 5, No. 5. P. 995–1018.
7. *Fleisher R. L., Price P. B., Walker R. M.* // J. Appl. Phys. 1965. V. 36, No. 11. P. 3645–3652.
8. *Fleisher R. L., Price P. B., Walker R. M.* Nuclear Track in Solids. Los Angeles: University of California. 1975.
9. *Баранов И. А. и др.* // УФН. 1988. Т. 156, № 3. С. 477–510.
10. *Баранов И. А., Кривохатский А. С., Обнорский В. В.* // ЖТФ. 1981. Т. 51, № 12. С. 2457–2475.
11. *Baranov I. et al.* // Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. B. 2002. V. 193. P. 798–803.

12. *Baranov I. et al.* // *Ibid.* P. 809–815.
13. *Yavlinskii Yu.* // *Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. B.* 1998. V. 146, Nos. 1–4. P. 142–146.
14. *Seitz F., Koehler J. S.* // *Sol. St. Phys.* 1956. V. 2. P. 251.
15. *Vineyard G. H.* Thermal spikes and activated processes // *Radiat. Eff.* 1976. V. 29, No. 4. P. 245–248.
16. *Лифшиц И. М., Каганов М. И., Танатаров Л. В.* К теории релаксационных изменений в металлах // *Атомная энергия.* 1959. Т. 6. С. 391–402.
17. *Каганов М. И., Лифшиц И. М., Танатаров Л. В.* Релаксация между электронами и решеткой // *ЖЭТФ.* 1956. Т. 31, № 2(8). С. 232–237.
18. *Лифшиц И. М.* О температурных вспышках в среде, подверженной действию ядерного излучения // *ДАН СССР.* 1956. Т. 109, № 6. С. 1109–1111.
19. *Гегузин Я. Е., Каганов М. И., Лифшиц И. М.* Влияние длины свободного пробега электронов на образование трека траектории заряженной частицы в металле // *ФТТ.* 1973. Т. 15, № 8. С. 2425–2428.
20. *Давыдов А. А., Калиниченко А. И.* Механические эффекты вблизи ионных треков и термических пиков // *Вопросы атомной науки и техники. Сер.: Физика радиационных повреждений и радиационное материаловедение.* 1985. Вып. 3(36). С. 27–30.
21. *Дидык А. Ю., Робук В. Н., Семина В. К.* Препринт ОИЯИ Р17-2003-30. Дубна, 2003.
22. *Амирханов И. В. и др.* Препринт ОИЯИ Р11-2004-165. Дубна, 2004.
23. *Waligorski M. R. P., Hamm R. N., Katz R.* The radial distribution of dose around the path of a heavy ion in liquid water // *Nucl. Tracks and Radiat. Meas.* 1986. V. 11. P. 306–319.
24. *Dufour C., Paumier E., Toulemonde M.* // *Radiat. Eff. and Defects in Solids.* 1993. V. 126. P. 119.
25. *Bitensky I. S., Dimirev P., Sundvist 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.
26. *Самарский А. А., Гулин А. В.* Устойчивость разностных схем. М.: Наука, 1973.

Получено 30 сентября 2005 г.

Корректор *Е. В. Сабеева*

Подписано в печать 8.11.2005.

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

Усл. печ. л. 0,88. Уч.-изд. л. 1,07. Тираж 320 экз. Заказ № 55088.

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

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

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