

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

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

Лаборатория информационных технологий, ОИЯИ

А.Ю. Дидык

Лаборатория ядерных реакций, ОИЯИ

Abstract

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

1. ВВЕДЕНИЕ

В последние годы значительные усилия 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, 2, 3, 4, 5]. Такая структура за счет присутствия 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, присущих материалу подложки. Часто такие материалы не образуют гомогенизированный твердый раствор, с выделением новой фазы, то есть они не смешиваются друг с другом [1, 2, 3]. Поэтому задача увеличения коэффициента адгезии, то есть 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, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17] при таком воздействии за счет высоких ионизационных потерь энергии $S_{inel} = - \left(\frac{\partial E}{\partial z} \right)_{inel}$ 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 также важны для прикладных целей, а именно для использования данных эффектов в развитии новых технологий и совершенствовании уже имеющихся.

В работе [26] применена модель термического пика в трехмерном случае [18, 19, 20, 21, 22] для вычисления температуры решетки (T_i) и электронов (T_e) в двухслойном материале на примере структуры Ni(2мкм)/W при облучении ионами ^{209}Bi с энергией 710 МэВ с учетом зависимости теплофизических параметров от температуры при неидеальном тепловом контакте на границе раздела материалов.

2. МОДЕЛЬ ТЕМПЕРАТУРНОГО ПОВЕДЕНИЯ ДВУХСЛОЙНОГО МАТЕРИАЛА

В работах [6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 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, 7, 8, 20, 21, 22, 23, 24, 25]. С учетом анизотропии и аксиальной симметрии неупругих потерь энергии тяжелого иона высокой энергии $S_{inel} = -\left(\frac{\partial E}{\partial z}\right)_{inel}$ система уравнений для определения решеточной и электронной температур (модель термического пика) в цилиндрической системе координат в обоих слоях может быть записана в виде [18, 19, 20, 21]:

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

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 $A_v(r, z, t)$ – объемная плотность вносимых ионом мощностей в обоих материалах, может быть представлена в виде наиболее часто используемого выражения [18, 19, 20, 21]:

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

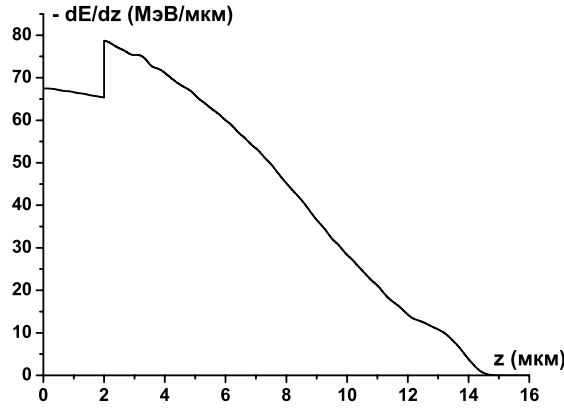


Рис. 1: Зависимость удельных ионизационных потерь энергии $S_{inel}(z)$

где $S_{inel}(z)$ – 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].

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

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

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

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial T_{e,v}(r, z, t)}{\partial r} \right|_{r=0} &= 0, \quad \left. \frac{\partial T_{i,v}(r, z, t)}{\partial r} \right|_{r=0} = 0, \\ T_{e,v}(r = R_{\max}, z, t) &= T_0, \quad T_{i,v}(r = R_{\max}, z, t) = T_0, \\ \left. \frac{\partial T_{e,1}(r, z, t)}{\partial z} \right|_{z=0} &= 0, \quad \left. \frac{\partial T_{i,1}(r, z, t)}{\partial z} \right|_{z=0} = 0, \\ T_{e,2}(r, z = Z_{\max}, t) &= T_0, \quad T_{i,2}(r, z = Z_{\max}, t) = T_0, \end{aligned} \quad (3)$$

где $v = 1, 2$, $0 < r < R_{\max}$, $0 < z < z_{\max}$, $0 < t < t_{\max}$, $T_0 = 300$ К, и условиями сопряжения на границе раздела двух материалов

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

где $0 < r < R_{\max}$, $0 < t < t_{\max}$, θ – 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) θ – коэффициент конвективной теплоотдачи, который, в отличие от χ , 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 θ составляет $10^{-3} - 10^2$ Вт/(см²·К) [25].

Нелинейные параметры модели, т.е. функции $C_{e,v}(T_{e,v})$, $C_{i,v}(T_{i,v})$, $\chi_{e,v}(T_{e,v})$, $\chi_{i,v}(T_{i,v})$, $g_v(T_{e,v})$, также метод численного решения и проверка сходимости численной схемы приведены в [26].

3. ОБСУЖДЕНИЕ ПОЛУЧЕННЫХ РЕЗУЛЬТАТОВ

Решая систему уравнений (1) 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(2мкм)/W при облучении ее ионами висмута с энергией 710 МэВ.

На *рис. 2, 3* представлены зависимости от времени температур электронного газа (слева) и кристаллической решетки (справа) 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* и *рис. 5*, где представлены зависимости от времени температур электронного газа (слева) и кристаллической решетки (справа) 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.

На *рис. 6* представлены временные зависимости разницы температур в слоях на границе раздела двух материалов (т.е. при $z = H = 2 \cdot 10^4 \text{ \AA}$) для электронной подсистемы (слева) и кристаллической решетки (справа), 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 θ , взятых из интервала указанной в [25], решения системы качественно не отличаются и совпадают с результатами при $\theta = 10^4$. Для исследования влияния этого коэффициента мы взяли его значение за пределы указанного интервала. Видно,

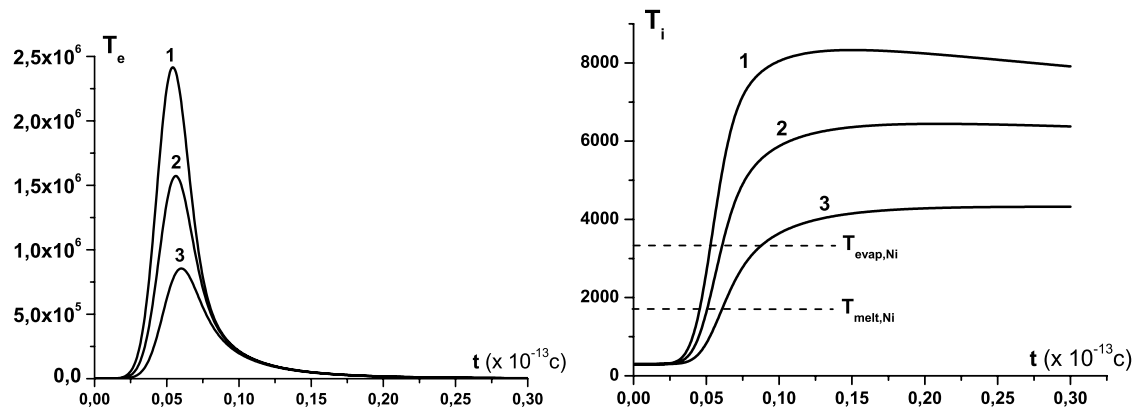


Рис. 2: Зависимость от времени температуры электронного газа (слева) и кристаллической решетки (справа) на поверхности образца первого слоя (никель) на различных расстояниях r (1 — $r = 0\text{Å}$, 2 — $r = 20\text{Å}$, 3 — $r = 40\text{Å}$) от траектории иона в рамках линейной модели термического пика. Штрихованными линиями обозначены температуры плавления и испарения никеля

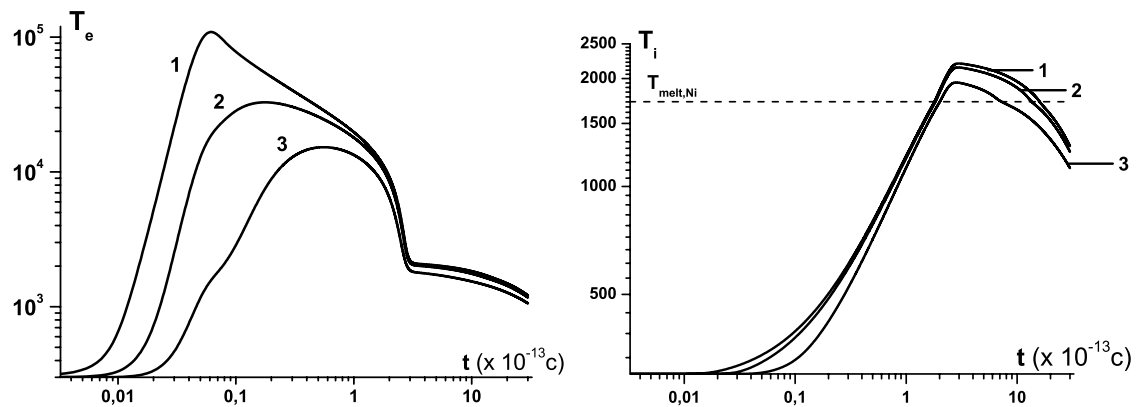


Рис. 3: Зависимость от времени температуры электронного газа (слева) и кристаллической решетки (справа) на поверхности образца первого слоя (никель) на различных расстояниях r (1 — $r = 0\text{Å}$, 2 — $r = 50\text{Å}$, 3 — $r = 100\text{Å}$) от траектории иона в рамках нелинейной модели термического пика. Штрихованной линией обозначена температура плавления никеля

что при увеличении коэффициента конвективной теплоотдачи θ разницы 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 $r = 0, 20, 40\text{Å}$. Видно, что решеточная температура в первом слое превышает температуру второго слоя и растет более быстро из-за соотношения коэффициентов, характеризующие тепловые процессы.

4. ВЫВОДЫ

В работе на основе линейной и нелинейной моделей термического пика получены результаты численного анализа температурных эффектов в двухслойном материале Ni(2мкм)/W при облучении ионами ^{209}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:

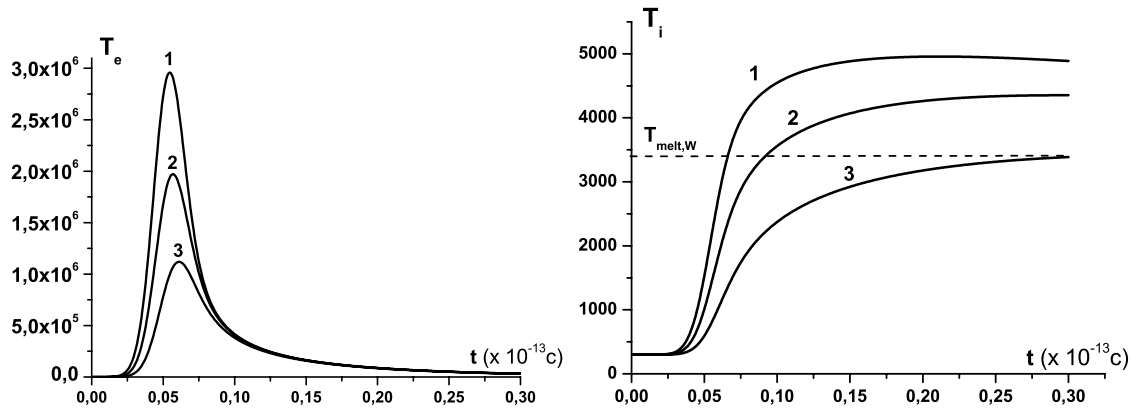


Рис. 4: Зависимость от времени температуры электронного газа (слева) и кристаллической решетки (справа) при $z = H + h_z$ и облучении ионами висмута с энергией 710 МэВ на различных расстояниях r (1 – $r = 0\text{\AA}$, 2 – $r = 20\text{\AA}$, 3 – $r = 40\text{\AA}$) от траектории иона в рамках линейной модели термического пика. Штрихованной линией обозначена температура плавления вольфрама

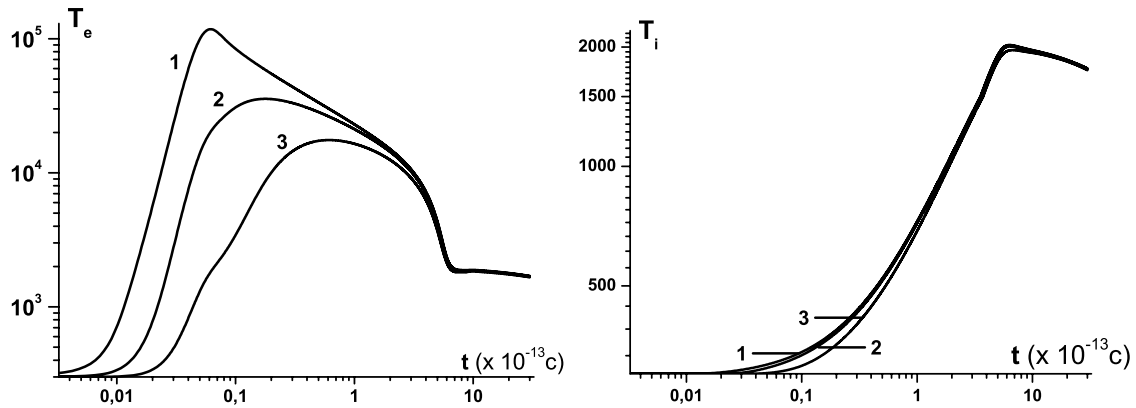


Рис. 5: Зависимость от времени температуры электронного газа (слева) и кристаллической решетки (справа) при $z = H + h_z$ и облучении ионами висмута с энергией 710 МэВ на различных расстояниях r (1 – $r = 0\text{\AA}$, 2 – $r = 50\text{\AA}$, 3 – $r = 100\text{\AA}$) от траектории иона в рамках линейной модели термического пика

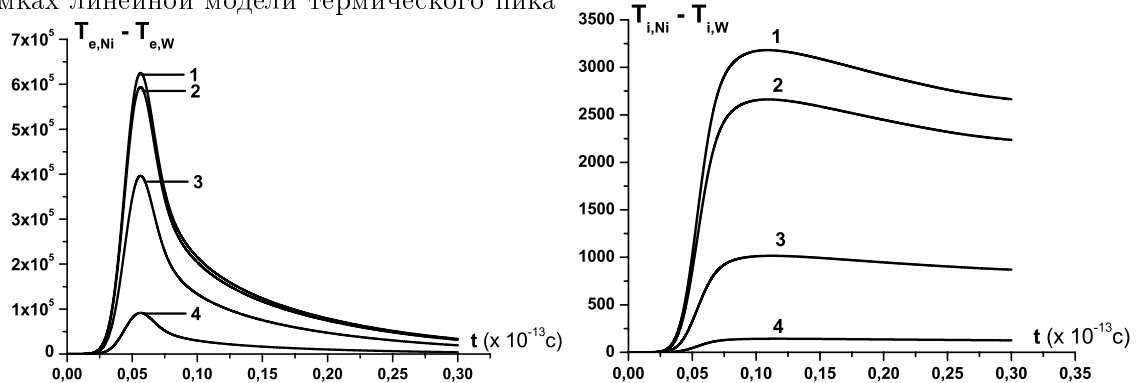


Рис. 6: Временная зависимость разницы температур (в абсолютных значениях) в слоях на границе раздела двух материалов для электронной подсистемы (слева) и кристаллической решетки (справа), в случае неидеального контакта, для различных значений эффективного коэффициента конвективной теплоотдачи θ (1 –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

1. Как однозначно показано численным анализом модели теплового пика, все про-

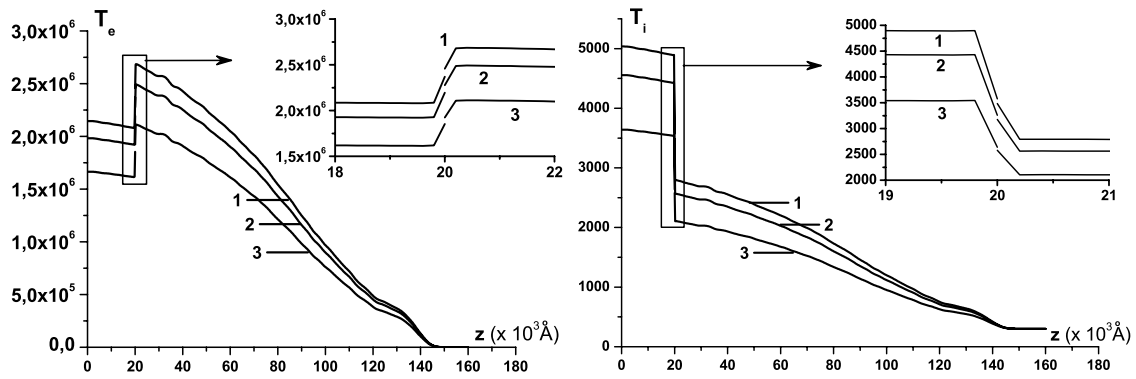


Рис. 7: Зависимость электронных (слева) и решеточных (справа) температур в слоях от глубины z (глубина раздела слоев $H = 2 \cdot 10^4 \text{ \AA}$) в рамках линейной модели ($\theta = 10^7$, $t = 0,06 \cdot 10^{-13} \text{ с}$) на различных расстояниях r (1 — $r = 0 \text{ \AA}$, 2 — $r = 20 \text{ \AA}$, 3 — $r = 40 \text{ \AA}$) от траектории иона

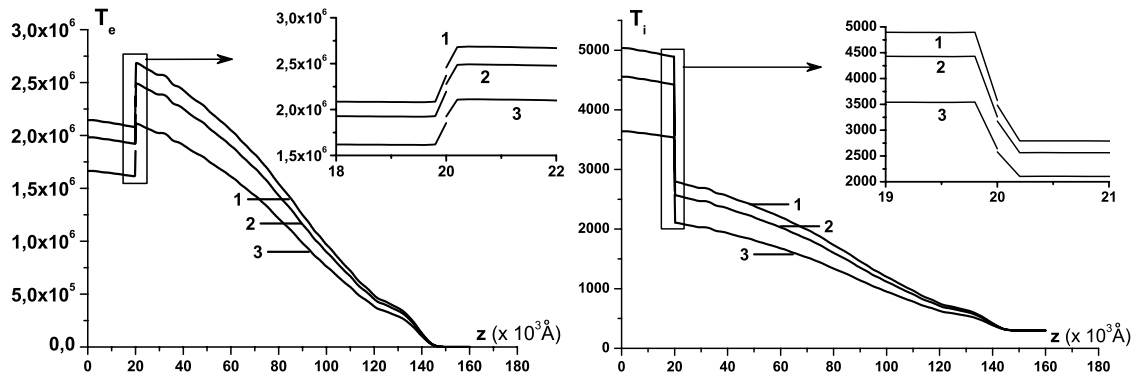


Рис. 8: Зависимость электронных (слева) и решеточных (справа) температур в слоях от глубины z (глубина раздела слоев $H = 2 \cdot 10^4 \text{ \AA}$) в рамках нелинейной модели ($\theta = 10^7$, $t = 0,06 \cdot 10^{-13} \text{ с}$) на различных расстояниях r (1 — $r = 0 \text{ \AA}$, 2 — $r = 20 \text{ \AA}$, 3 — $r = 40 \text{ \AA}$) от траектории иона

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 гораздо меньшие времена, чем в нелинейной модели.

2. При значительном увеличении коэффициента конвективной теплоотдачи θ 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. Выравнивания температур электронного газа и кристаллической решетки в линейной модели наступают через $t = 0,25 \cdot 10^{-15} \text{ с}$ для никеля и $t = 0,35 \cdot 10^{-15} \text{ с}$ для вольфрама, а в нелинейной модели через $t = 3 \cdot 10^{-13} \text{ с}$ для никеля и $t = 6,5 \cdot 10^{-13} \text{ с}$ 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 $D_{\max}^{melt}(z=0) \approx 222\text{\AA}$, $D_{\max}^{melt}(z=H) \approx 219\text{\AA}$, для вольфрама $D_{\max}^{melt}(z=H) \approx 80\text{\AA}$, и $Z_{\max}^{melt}(r=0) \approx 4,4 \cdot 10^4\text{\AA}$, (D_{\max}^{melt} – оценка максимального диаметра, и Z_{\max}^{melt} – оценка максимальной глубины расплавленной области). Аналогичная поверхность для температуры испарения в никеле имеет размеры $D_{\max}^{evap}(z=0) \approx 149\text{\AA}$ и $D_{\max}^{evap}(z=H) \approx 147\text{\AA}$.

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

Список литературы

- [1] W.Bolse, B.Schattat, Nucl. Instr. and Meth. in Phys.Res. B **190**, 173 (2002).
- [2] Z.C.Li, D.P.Yu and B.X.Liu, Phys. Rev. B **65**, 245403 (2002).
- [3] M.Nastasi and J.W.Mayer, Rad. Eff. and Def. in Solids **130-131**, 367 (1994).
- [4] R. Leguay et al., Nucl.Instr. and Meth. in Phys.Res. B **106**, 28 (1995).
- [5] Bolse W, Surf. And Coating Techn. **158-159**, 1-7 (2002).
- [6] Wang Z.G. et al., J. Phys.: Condens. Matter. **6**, №34, 6733 (1994).
- [7] Ch.Dufour et al, J. Phys.: Condens. Matter. **5**, №26, 4573 (1993).
- [8] A.Audouard et al, J. Phys: Condens. Matter. **5**, №5, 995 (1993).
- [9] R.L.Fleisher, P.B.Price, R.M.Walker, J. Appl. Phys. **36**, №11, 3645 (1965).
- [10] R.L.Fleisher, P.B.Price, R.M.Walker, Los Angelos: University of California. (1975).
- [11] F.Seitz, J.S.Koehler, Sol. St. Phys. **2**, 251 (1956).
- [12] G.H.Vineyard, Radiat. Eff. **29**, №4, 245 (1976).
- [13] И.М.Лифшиц, М.И.Каганов, Л.В.Танатаров, Атомная энергия. **6**, 391 (1959).
- [14] М.И.Каганов, И.М.Лифшиц, Л.В.Танатаров, ЖЭТФ. **31**, №2(8), 232 (1956).
- [15] Я.Е.Гегузин, М.И.Каганов, И.М.Лифшиц, ФТТ. **15**, №8, 2425 (1973).
- [16] А.А.Давыдов, А.И.Калиниченко, Вопросы атомной науки и техники. Сер.: Физика радиационных повреждений и радиационное материаловедение. **3(36)**, 27 (1985).
- [17] А.Ю.Дидык, В.Н.Робук, В.К.Семина, Препринт ОИЯИ Р17-2003-30, (2003).
- [18] И.В.Амирханов и др., Письма в ЭЧАЯ **3**, №1(130), 63 (2006).
- [19] И.В.Амирханов и др., Письма в ЭЧАЯ **3**, №5(134), 80 (2006).
- [20] I.V.Amirkhanov et al., Crystallography Report. No 51, Suppl.1, S32 (2006).
- [21] И.В.Амирханов и др., ЭЧАЯ. **37**, вып.6, 1592 (2006).
- [22] Y.N.Cheblukov et al., NUKLEONIKA. **49**, No1, 15 (2004).
- [23] Baranov I. et al., Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. B **193**, 798 (2002).
- [24] Baranov I. et al., Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. B **193**, 809 (2002).
- [25] Луканин В.Н. и др., Теплотехника. М.: Высш. шк., с. 281, (2003).
- [26] Амирханов И.В. и др., Препринт ОИЯИ, Р11-2007-105.