

# Моделирование тепловых процессов в материалах при облучении тяжелыми ионами высоких энергий с функцией источника, зависящей от скорости иона

И.В. Амирханов<sup>1</sup>, А.Ю. Дидык<sup>2</sup>, Д.З. Музафаров<sup>1</sup>, И.В. Пузынин<sup>1</sup>, Т.П. Пузынина<sup>1</sup>, Н.Р. Саркар<sup>1</sup>, И. Сархадов<sup>1</sup>, З.А. Шарипов<sup>1</sup>

<sup>1</sup>e-mail: camir@jinr.ru, Лаборатория информационных технологий, ОИЯИ, Дубна; <sup>2</sup> Лаборатория ядерных реакций, ОИЯИ, Дубна

## Введение

В последние годы с возрастающим интересом проводятся экспериментальные исследования для изучения воздействий тяжелых заряженных частиц на материалы. К таким исследованиям относятся, в частности, изучение особенностей радиационного распыления, образования треков и изменения механических свойств материалов при облучении их тяжелыми ионами высоких энергий. Заметим, что, несмотря довольно длительный период исследований, условия образования "треков" в твердых телах неясны в деталях до сих пор.

Около пятидесяти лет назад были предложены две модели для объяснения причин возникновения "трека" в диэлектриках, а именно: модель термического пика [1] и механизм кулоновского взрыва [2]. Отметим, что "треком" тяжелой заряженной частицы принято называть сильно разрушенную область вблизи траектории тяжелой частицы в материале, созданную вследствие тепловых процессов, вызванных ионизационными потерями энергии тяжелой заряженной частицы приводящих к расплавлению и последующей частичной (или полной) рекристаллизации этой области.

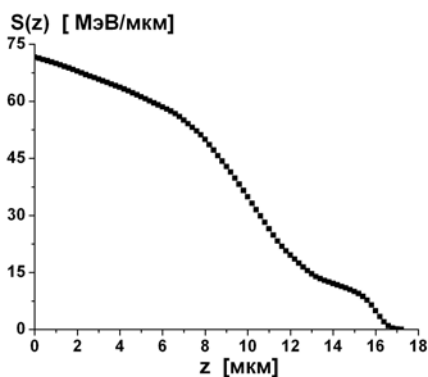


Рис. 1: Зависимость полных потерь энергии  $S(z)$  иона урана с энергией  $E_0 = 700$  МэВ от глубины  $z$  в никелевой мишени

В данной работе предлагается модифицированная модель термического пика, учитывающая движение иона внутри материала. Компью-

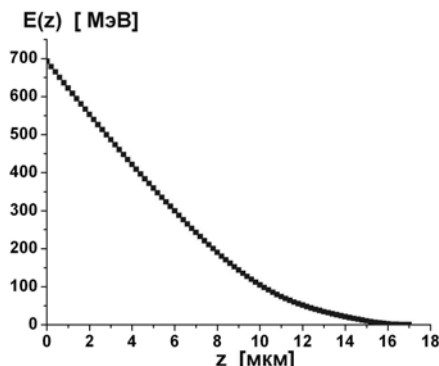


Рис. 2: Зависимость энергии  $E(z)$  иона урана от глубины  $z$  в никелевой мишени

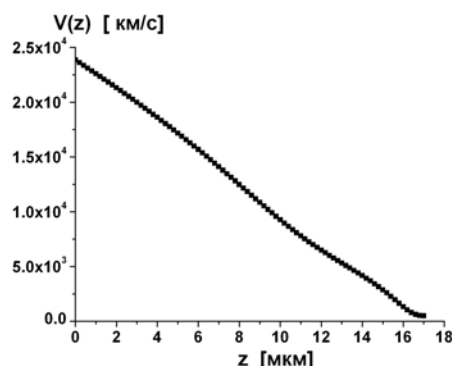


Рис. 3: Зависимость скорости  $V(z)$  иона урана от глубины  $z$  в никелевой мишени

терная программа SRIM-2008 [3] позволяет вычислить потери энергии тяжелого иона при его прохождении через конденсированные среды, а именно:

1) неупругие потери энергии:

$$S_{inel}(z) \equiv - \left( \frac{\partial E}{\partial z} \right)_{inel} ;$$

2) упругие потери энергии:

$$S_{elastic}(z) \equiv - \left( \frac{\partial E}{\partial z} \right)_{elastic} ;$$

3) фононные возбуждения:

$$S_{phonon}(z) \equiv - \left( \frac{\partial E}{\partial z} \right)_{phonon} .$$

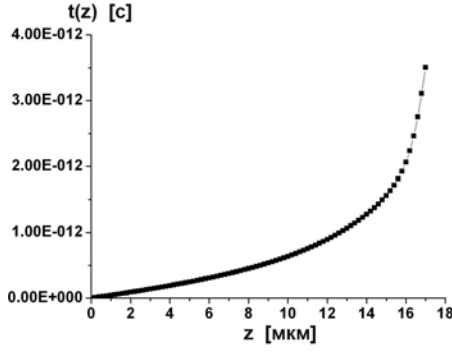


Рис. 4: Зависимость скорости  $V(z)$  (слева) и времени  $t(z)$  (справа) иона урана с энергией  $E_0 = 700$  МэВ от глубины  $z$  в никелевой мишени

Большое значение для понимания динамики процесса имеет время прохождения иона в мишени от облучаемой поверхности до его полной остановки.

На рис.1 представлена функция  $S(z) = S_{inel}(z) + S_{elastic}(z) + S_{phonon}(z)$  полных потерь энергии иона урана с энергией 700 МэВ в зависимости от глубины  $z$  в никелевой мишени. Используя эти данные, можно вычислить следующие величины, характеризующие прохождение иона в мишени:

а) энергию:

$$E(z) = E_0 - \int_0^z S(\xi) d\xi;$$

б) скорость:

$$V(z) = \sqrt{\frac{2E(z)}{M_0}};$$

в) а также время:

$$t(z) = \int_0^z \frac{d\xi}{V(\xi)}$$

в зависимости от глубины  $z$  в никелевой мишени ( $M_0$ -масса иона). На рис.2 – рис.4 приведены эти величины для иона урана с энергией  $E_0 = 700$  МэВ от глубины  $z$  в никелевой мишени.

Используя последнюю формулу  $t(z)$ , можно оценить полное время прохождения иона в мишени до его полной остановки, которое оказывается равным:  $\Delta t \approx 4 \times 10^{-12}$  с.

### Модель термического пика

С учетом аксиальной симметрии система уравнений для определения решеточной и электронной температур в цилиндрической системе координат может быть записана в виде [4]:

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

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

здесь  $T_e$  и  $T_i$  температура электронного газа и решетки,  $C_e, C_i, \lambda_e, \lambda_i$  - теплофизические параметры системы при комнатной температуре,  $g$  - коэффициент взаимодействия электронной и решеточной подсистем, функция  $A(r, z, t)$  - объемная плотность вносимой ионом мощности (функция источника). В предыдущих работах источник выбирали в виде:

$$A(r, z, t) = bS_{inel}(z) \exp\left(-\frac{(t-t_0)^2}{2\sigma_t^2}\right) \times \exp\left(-\frac{r}{r_0}\right), \quad (3)$$

В данной работе с учетом полученной выше зависимости  $t(z)$ , источник запишем в следующем виде:

$$A(r, z, t) = bS_{inel}(z) \exp\left(-\frac{(t-t_0-t(z))^2}{2\sigma_t^2}\right) \times \exp\left(-\frac{r}{r_0}\right), \quad (4)$$

Источник (3) действует в мишень за времена  $0 < t < 10^{-14}$  с при  $0 \leq z \leq Z_m$ . В отличие от функции источника (3) функция источника в виде (4) действует в мишени локально в области нахождения иона, и эта область движется вместе с ионом до его остановки. Система уравнений (1), (2) решалась со следующими начальными и граничными условиями:

$$T_{e,i}(r, z, 0) = T_0 = 300K, \quad (5)$$

$$\left. \frac{\partial T_{e,i}(r, z, t)}{\partial r} \right|_{r=0} = 0, \quad \left. \frac{\partial T_{e,i}(r, z, t)}{\partial z} \right|_{z=0} = 0, \quad (6)$$

$$T_{e,i}(R_{max}, z, t) = T_{e,i}(r, Z_{max}, t) = 300K.$$

Для численного решения системы уравнений (1) - (6) была использована явная конечно-разностная схема с порядком аппроксимации  $O(h_t + h_r^2 + h_z^2)$  и схема переменных направлений с порядком аппроксимации  $O(h_t + h_r^2 + h_z^2)$  [5].

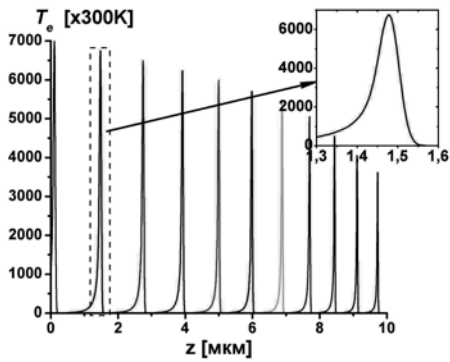


Рис. 5: Температурные зависимости по глубине мишени вдоль оси OZ электронного газа в различные моменты времени с шагом по времени  $h_t = 0,6 \times 10^{-13}c$

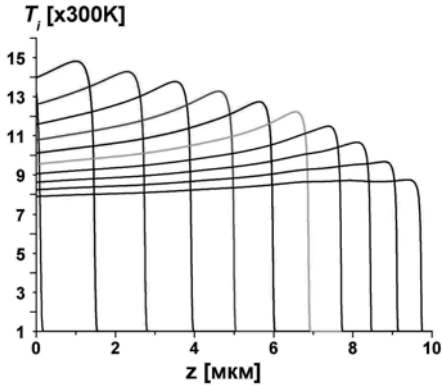


Рис. 6: Температурные зависимости по глубине мишени вдоль оси OZ решетки в различные моменты времени с шагом по времени  $h_t = 0,6 \times 10^{-13}c$

## Результаты исследований

На рис.5 и рис.6 представлены температурные зависимости от глубины  $z$  в мишени вдоль оси OZ для электронного газа и решетки в различные моменты времени с шагом по времени  $h_t = 0,6 \times 10^{-13}c$ . Из рисунка видно, что функция источника действует на глубине  $z$  в том месте, где находится в данный момент тяжелый ион. На рис.7 для сравнительного анализа представлены изотермические поверхности, ограничивающие выделенный объем, в котором температура равна температуре плавления никеля без учета движения иона (верхний рисунок) и с учетом движения иона (нижний рисунок) в различные моменты времени.

## Заключение

В работе предложена модель термического пика, учитывающая движение налетающего иона внутри материала при облучении. В рамках данной модели получены результаты численного исследования температур электронного газа и решетки в никелевой мишени при ее облучении

ионами урана с энергией 700 МэВ. Выполнен численный анализ расчетных схем. По результатам вычислительных экспериментов можно сделать следующие выводы:

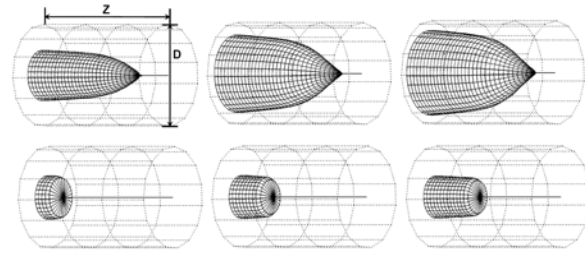


Рис. 7: Изотермические поверхности, ограничивающие выделенный объем, в котором температура равна температуре плавления никеля без учета движения иона (верхний рисунок) в моменты времени  $t_1 = 1,2 \times 10^{-14}c$ ,  $t_2 = 1,7 \times 10^{-14}c$ ,  $t_3 = 3,0 \times 10^{-14}c$  и с учетом движения иона (нижний рисунок) в моменты времени  $t_1 = 10^{-13}c$ ,  $t_2 = 2,0 \times 10^{-13}c$  и  $t_3 = 3,0 \times 10^{-13}c$ . Размеры цилиндра, то есть штрихованной области составляют: диаметр  $D = 280\text{\AA}$ , глубина  $z = 16,8 \times 10^4\text{\AA}$ .

1. Введенная в данной модели термического пика функция источника, зависящая от скорости иона с полным (максимальным) временем прохождения иона через облучаемый слой, равным  $\Delta t \approx 4 \times 10^{-12}c$  приводит к тому, что тепловые процессы отличаются от процессов в модели с неподвижной функцией источника (см. рис.7).

2. Размер области, где температура превышает температуру плавления материала, значительно меньше по сравнению с размерами аналогичной области, вычисленной в модели без учета движения иона: в частности,  $r_{max} \approx 62\text{\AA}$ ,  $z = 0$  (рис.7) при учете движения иона и  $r_{max} \approx 115\text{\AA}$ ,  $z = 0$  при неучете движения иона.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, гранты № 09-01-00770-а и № 08-01-00800а.

## Список литературы

- [1] Лифшиц И.М. // Докл. АН СССР, 1956, т.109, № 6. с.1109-1111.
- [2] Fleisher R.L., Price P.B., Walker R.M. // J. Appl. Phys., 1965, 36, №11, pp.3645-3652.
- [3] Biersack J.P. and Haggmark L.G. // Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res., 1980, B174, pp.257-269. (<http://www.srim.org>)
- [4] Амирханов И.В., Дидык А.Ю., Пузынин И.В. и др. // Физика элементарных частиц и атомного ядра (ЭЧАЯ), 2006, т.37, вып.6, с.1592-1644.
- [5] Самарский А.А. Теория разностных схем. М.: Наука, 1983, с.258-276.