

УДК 919.633, 536.212

Модель теплового пика для материалов, облучаемых тяжёлыми ионами высоких энергий, с функцией источника, зависящей от скорости иона

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

*Лаборатория информационных технологий
Объединённый институт ядерных исследований
ул. Жолио-Кюри д.6, Дубна, Московская область, 141980, Россия*

При прохождении тяжёлых ионов через конденсированные среды потери энергии затрачиваются на упругое, неупругое взаимодействие и фононные возбуждения. Для численного моделирования процессов принципиальное значение имеет время прохождения иона от облучаемой поверхности до его полной остановки в мишени. Выполненные расчёты показали, что время прохождения ионов урана с энергией 700 МэВ в никелевой мишени составляет $\Delta t \approx 4 \times 10^{-12}$ с. В предыдущих работах не учитывалось движение иона внутри материала и использовалась функция источника со временем действия $\Delta t \approx 10^{-14}$ с. В данной работе предлагается модель термического пика с функцией источника, учитывающей прохождение иона через облучаемый слой материала. Приведены результаты расчётов при облучении никелевой мишени ионами урана с энергией 700 МэВ и сделан сравнительный анализ с предыдущими результатами, где не учитывалось перемещение иона внутри материала.

Ключевые слова: термический пик, треки, моделирование, численные методы.

1. Введение

В последние годы с возрастающим интересом проводятся экспериментальные исследования для изучения воздействий тяжёлых заряженных частиц на материалы. К таким исследованиям относятся, в частности, изучение особенностей радиационного распыления, образования треков и изменения механических свойств материалов при облучении их тяжёлыми ионами высоких энергий. Заметим, что, несмотря на довольно длительный период исследований, условия образования «треков» в твёрдых телах не ясны 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» тяжёлой заряженной частицы принято называть сильно деструктурированную область вблизи траектории тяжёлой частицы в материале, созданную вследствие тепловых процессов, вызванных ионизационными потерями энергии тяжёлой заряженной частицы, приводящих к расплавлению и последующей частичной (или полной) рекристаллизации этой области.

В данной работе предлагается модифицированная модель термического пика, учитывающая движение иона внутри материала. Компьютерная программа SRIM-2008 [3] позволяет вычислить потери энергии тяжёлого иона при его прохождении через конденсированные среды, а именно: 1) неупругие потери энергии $S_{inel}(z)$; 2) упругие потери энергии $S_{elastic}(z)$; 3) фононные возбуждения $S_{phonon}(z)$. Большое значение для понимания динамики процесса имеет время прохождения иона в мишени от облучаемой поверхности до его полной остановки.

На рис. 1 (слева) 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

Статья поступила в редакцию 28 ноября 2009 г.

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

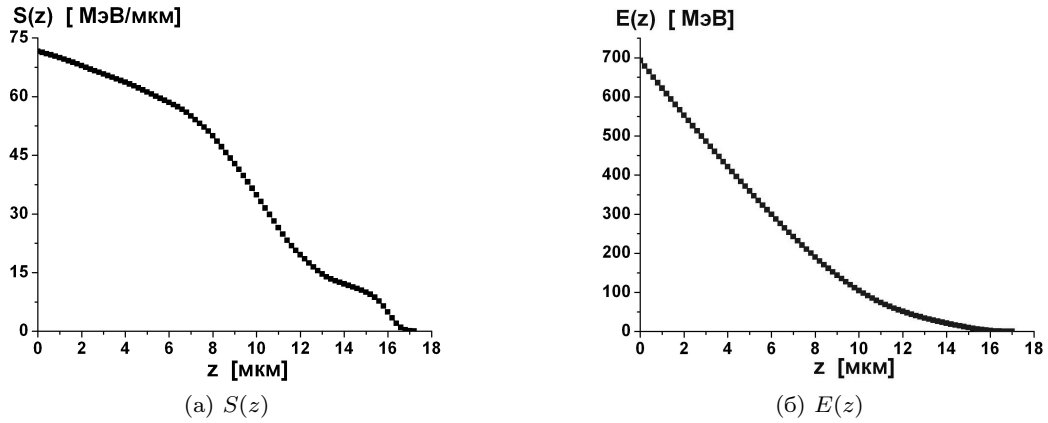


Рис. 1. Зависимость полных потерь энергии $S(z)$ (а) и энергии $E(z)$ (б) иона урана с энергией $E_0 = 700$ МэВ от глубины z в никелевой мишени

z в никелевой мишени. Используя эти данные, можно вычислить следующие величины, характеризующие прохождение иона в мишени: энергию $E(z)$, скорость $V(z)$, а также время $t(z)$ в зависимости от глубины z в никелевой мишени. На рис. 1 и рис. 2 приведены эти величины для иона урана с энергией $E = 700$ 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 $\Delta t \approx 4 \times 10^{-12} c$.

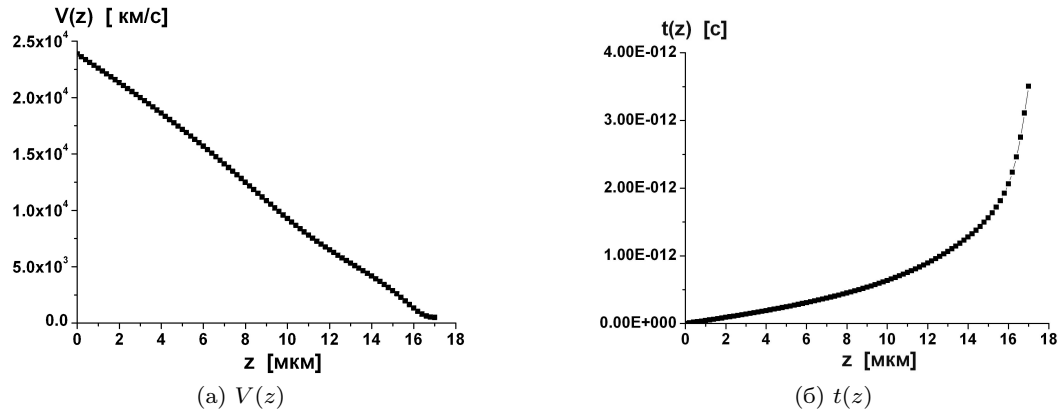


Рис. 2. Зависимость скорости $V(z)$ (а) и времени (б) иона урана с энергией $E_0 = 700$ МэВ от глубины z в никелевой мишени

2. Модель термического пика

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

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

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

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

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

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

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

Источник (3) действует в мишень за времена $0 < t < 10^{-14}c$ 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:

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

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

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

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].

3. Результаты численного моделирования

На рис. 3 представлены температурные зависимости от глубины z в мишени вдоль оси OZ для электронного газа (слева) и решётки (справа) 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 тяжёлый ион. На рис. 4 для сравнительного анализа представлены изотермические поверхности, ограничивающие выделенный объём, в котором температура равна температуре плавления никеля без учёта движения иона (верхний рисунок) и с учётом движения иона (нижний рисунок) в различные моменты времени.

4. 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 решётки в никелевой мишени при её облучении ионами урана с энергией 700 МэВ. Выполнен численный анализ расчётных схем. По результатам вычислительных экспериментов можно сделать следующие выводы:

1. Введённая в данной модели термического пика функция источника, зависящая от скорости иона с полным (максимальным) временем прохождения иона через

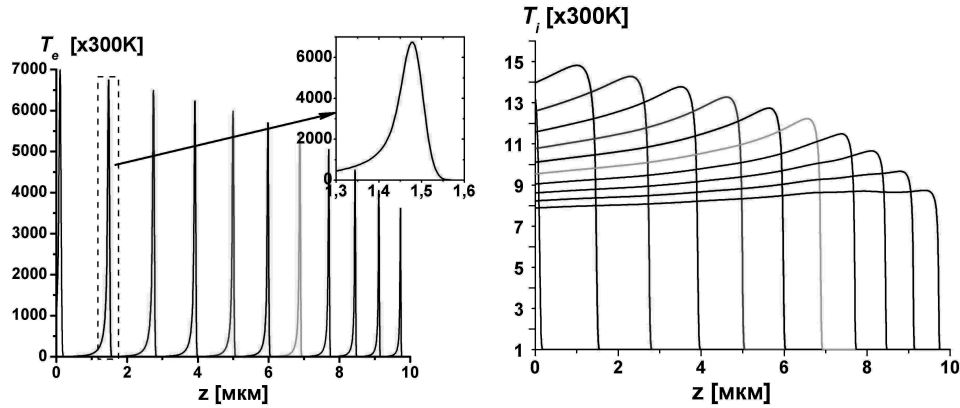


Рис. 3. Температурные зависимости по глубине мишени вдоль оси OZ электронного газа (слева) и решётки (справа) в различные моменты времени с шагом по времени $h_t = 0,6 \times 10^{-13}c$

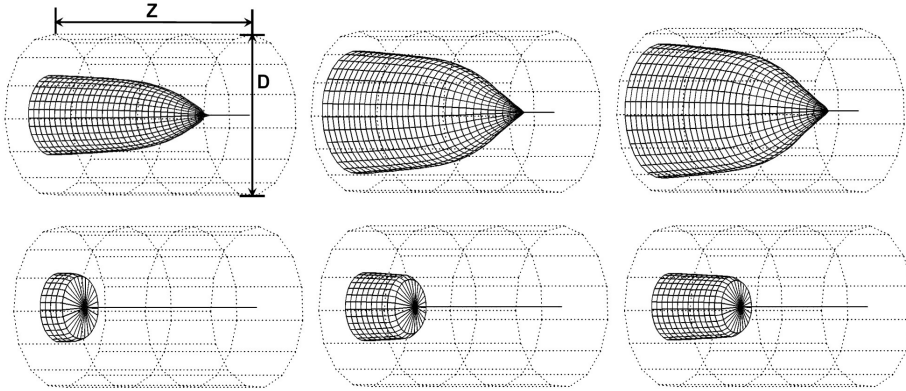


Рис. 4. Изотермические поверхности, ограничивающие выделенный объем, в котором температура равна температуре плавления никеля без учёта движения иона (верхний рисунок) в моменты времени $t_1 = 1,2 \times 10^{-14}c$, $t_2 = 1,7 \times 10^{-14}c$, $t_3 = 3,0 \times 10^{-14}c$ и с учётом движения иона (нижний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

облучаемый слой, равный $\Delta t \approx 4 \times 10^{-12}c$, приводит к тому, что тепловые процессы отличаются от процессов в модели с неподвижной функцией источника (см. рис. 4).

2. Размер области, где температура превышает температуру плавления материала, значительно меньше по сравнению с размерами аналогичной области, вычисленной в модели без учёта движения иона: в частности, $r_{\max} \approx 62\text{\AA}$, $z = 0$ (рис. 4) при учёте движения иона и $r_{\max} \approx 115\text{\AA}$, $z = 0$ при неучёте движения иона.

Литература

1. Лифшиц И. М. О температурных вспышках в среде, подверженной действию ядерного излучения // ДАН СССР. — 1956. — Т. 109, № 6. — С. 1109–1111.

2. *Fleischer R. L., Price P. B., Walker R. M.* Ion Explosion Spike Mechanism for Formation of Charged — Particle Tracks in Solids // *J. Appl. Phys.* — 1965. — Т. 36. — С. 3645–3652.
3. *Biersack J. P., Haggmark L. G.* A Monte Carlo Computer Program for the Transport of Energetic Ions in Amorphous Targets // *Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res.* — 1980. — Т. B174. — С. 257–269.
4. Распыление твёрдых тел под действием тяжёлых ионов и температурные эффекты в электронной и решеточной подсистемах / И. В. Амирханов, А. Ю. Дидык, И. В. Пузынин и др. // *Физика элементарных частиц и атомного ядра (ЭЧАЯ)*. — 2006. — Т. 37. — С. 1592–1644.
5. *Самарский А. А.* Теория разностных схем. — М.: Наука, 1983. — С. 258–276.

UDC 919.633, 536.212

The Thermal Spike Model in Materials at Irradiation by High Energy Heavy Ions with the Radiant Function Depending on the Ion Velocity

I. V. Amirkhanov, A. Yu. Didyk, D. Z. Muzafarov, I. V. Puzynin,
T. P. Puzynina, N. R. Sarker, I. Sarhadov, Z. A. Sharipov

*Laboratory of Information Technologies
Joint Institute for Nuclear Research
Joliot-Curie 6, 141980 Dubna, Moscow region, Russia*

At passage of heavy ions through condensed media, their energy losses are generally spent on elastic and inelastic interactions. The SRIM-2008 computer program allows calculating the energy losses of heavy ions at their passage through condensed media. Of great importance for the investigation is the time from the ion's hitting the target to its full stopping. The performed calculations (using the results of the SRIM-2008 program) have shown that the time of passage by a uranium ion of with the energy 700 MeV in a nickel target $\Delta t \approx 4 \times 10^{-12} c$. In the previous investigations, the motion of an ion in a material was not considered and a source with the action time $\Delta t \approx 10^{-14} s$ was used. In this paper the thermal spike model with a new source considering the motion of an ion within a material is proposed.

Key words and phrases: thermal spike, tracks, modeling, numerical methods.