

Моделирование образования треков в аморфных сплавах железа при облучении тяжёлыми ионами высоких энергий

И. В. Амирханов*, **А. Ю. Дидык[†]**, **И. В. Пузынин***,
Т. П. Пузынина*, **Н. Р. Саркар***, **И. С. Сархадов***,
З. К. Тухлиев*, **З. А. Шарипов***

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

*[†] Лаборатория ядерных реакций им. Г.Н. Флерова
Объединённый институт ядерных исследований
ул. Жолио-Кюри, д. 6, Дубна, Московская область, Россия, 141980*

Важным процессом как в фундаментальной радиационной физике твёрдого тела, так и в приложениях является процесс образования треков при облучении тяжёлыми ионами высоких энергий образцов различных по своим физико-химическим свойствам материалов. Развитие современных методов анализа и исследований структуры таких протяжённых дефектов стимулирует проведение новых экспериментальных и теоретических исследований в этой области. В экспериментальной работе диаметры треков 11.1 МэВ/нуклон ионов ^{132}Xe , ^{152}Sm , ^{197}Au и 8.2 МэВ/нуклон ионов ^{238}U в ряде аморфных сплавов на основе железа и бора были измерены с использованием метода малоуглового рассеяния синхротронного излучения. В данной работе трёхмерная модель термического пика, модифицированная с учётом фазовых переходов типа плавления, была введена и использована для оценки диаметров треков всех вышеперечисленных комбинаций ион-мишень, значения которых были сравнены с экспериментальными данными. Учёт фазовых переходов, сделанный в настоящей работе для оценки диаметров треков, значительно улучшил согласие результатов моделирования с экспериментальными данными.

Ключевые слова: моделирование, численные методы, фазовый переход, модель термического пика, треки.

1. Введение

В настоящее время одной из важных задач физики конденсированных сред является получение аморфных металлических сплавов (или металлического стекла, как часто их называют) и исследование их свойств с дальнейшими применениями в различных отраслях науки и техники. Аморфные сплавы металлов по своим физико-химическим характеристикам сильно отличаются от кристаллических сплавов. Существенным недостатком аморфных сплавов является их кристаллизация при высоких температурах ($T = 200 - 1000\text{C}$) с дальнейшим изменением физико-химических свойств. Одной из актуальных задач является исследование различных процессов (образование треков, дефектов, кристаллизация) в аморфных сплавах при облучении тяжёлыми ионами высоких энергий, т.к. при облучении вблизи области траектории иона температура материала может достигать высоких температур, превышающих температуру плавления и испарения.

Значительное количество работ посвящено исследованию образования треков в аморфных металлах и сплавах (например, [1, 2] и цитированная там литература). Треком тяжёлой заряженной частицы принято называть сильно деструктурированную область вблизи траектории тяжёлой частицы в материале, вызванных ионизационными потерями энергии приводящих к возможному расплавлению и последующей частичной (или полной) рекристаллизации этой области (в случае аморфных мишеней – к кристаллизации). В [1] были измерены диаметры треков в ряде аморфных сплавов на основе железа и бора для различных комбинаций

Статья поступила в редакцию 22 сентября 2013 г.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (гранты №13-01-00595-а, №12-01-00396-а и №11-01-00278-а).

мишень-ион с использованием метода малоуглового рассеяния синхротронного излучения. В настоящей работе в рамках модели термического пика (МТП) [3] была исследована образование треков в аморфных сплавах железа и бора в разных комбинациях мишень-ион. Моделирование динамики фазовых переходов типа плавления или затвердевания осуществляется на основе задачи Стефана. В настоящей работе фазовый переход моделируется в рамках энтальпийного подхода [4].

2. Постановка задачи

В основе МТП лежит система двух связанных уравнений теплопроводности для электронного газа и кристаллической решётки. Эта система уравнений в аксиально цилиндрической системе координат имеет следующий вид [3]:

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

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

Функция источника представляется в виде:

$$A_{e,i}(r, z, t) = \frac{1}{r_0^2} \exp(-r/r_0) \frac{1}{\sqrt{2\pi\delta_t}} \exp\left(-\frac{(t-5t_0)^2}{2\delta_t^2}\right) S_{inel,ph}(z). \quad (3)$$

Описание физических параметров, входящих в систему (1)–(2), приведено в [3].

На рис. 1 представлены потери энергии ионов Au, Sm, Xe (11.1 МэВ/нуклон), U (8.2 МэВ/нуклон) на ионизацию в аморфном сплаве Fe₈₀B₂₀ (а) и экспериментальные данные радиусов треков (б), приведённые в [1].

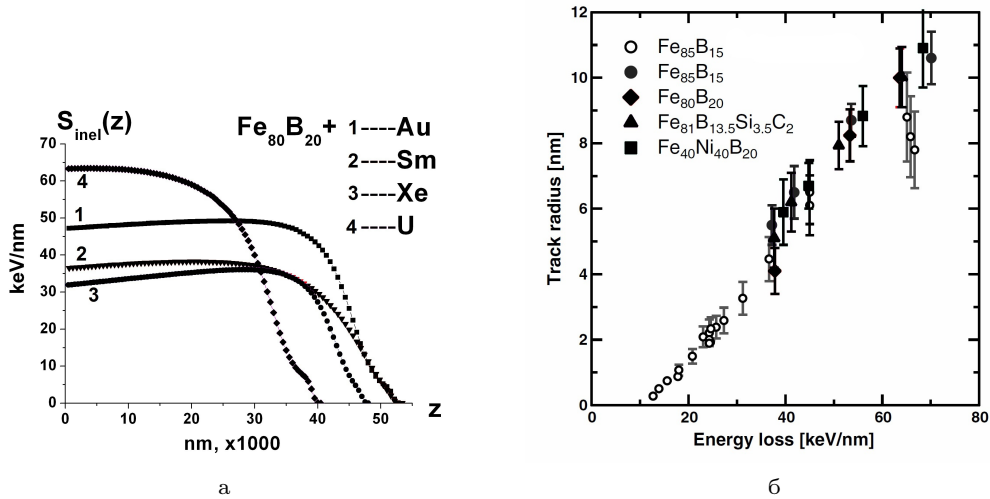


Рис. 1. Потери энергии ионов Au, Sm, Xe, U на ионизацию: (а) в аморфном сплаве Fe₈₀B₂₀, (б) экспериментальные данные [1]

Система (1)–(3) решается со следующими начальными и граничными условиями:

$$T_{e,i}(r, z, t)|_{t=0} = T_0, \quad (4)$$

$$\left. \frac{\partial T_{e,i}(r, z, t)}{\partial r} \right|_{r=0} = 0, \quad T_{e,i}(r, z, t)|_{r=R_{\max}} = 0, \quad (5)$$

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

Для численного решения системы уравнений (1)–(5) была использована конечно-разностная схема метода переменных направлений [5].

3. Полученные результаты

В табл. 1 представлены результаты расчётов для различных аморфных сплавов, демонстрирующие изменения размеров области плавления с учётом и без учёта фазовых переходов. В целом расчёты подтверждают, что полученные нами оценки размеров областей, где происходят процессы плавления, с учётом фазовых переходов значительно лучше согласуются с приведёнными в [1] экспериментальными оценками характерных размеров треков по сравнению с моделью без учёта фазовых переходов. При учёте фазовых переходов значительное количество энергии поглощается в точке плавления материала (на скрытую теплоту плавления), что приводит к снижению температуры мишени относительно модели без учёта фазового перехода и, вследствие этого, к уменьшению размера области плавления.

Таблица 1
Расчётные и экспериментальные радиусы треков

Мишень + ион	Радиус расплавленной области без учёта фазового перехода, нм	Радиус расплавленной области с учётом фазового перехода, нм	Экспериментальные оценки
Fe ₈₀ B ₂₀ + ²³⁸ U 8.2МэВ/нуклон	≈ 11.5	≈ 9.0	9.8 ± 0.3
Fe ₈₁ B _{13.5} Si _{3.5} C ₂ + ²³⁸ U 8.2МэВ/нуклон	≈ 11.5	≈ 9.0	9.8 ± 0.3
Fe ₄₀ Ni ₄₀ B ₂₀ + ²³⁸ U 8.2МэВ/нуклон	≈ 12.3	≈ 9.5	10.2 ± 0.3
Fe ₈₀ B ₂₀ + ¹⁵² Sm 11.1МэВ/нуклон	≈ 6.5	≈ 5.1	4.0 ± 0.3
Fe ₈₁ B _{13.5} Si _{3.5} C ₂ + ¹⁵² Sm 11.1МэВ/нуклон	≈ 6.5	≈ 5.1	4.8 ± 0.3
Fe ₄₀ Ni ₄₀ B ₂₀ + ¹⁵² Sm 11.1МэВ/нуклон	≈ 7.8	≈ 6.2	5.2 ± 0.3
Fe ₈₀ B ₂₀ + ¹⁹⁷ Au 11.1МэВ/нуклон	≈ 8.5	≈ 7.3	7.0 ± 0.3
Fe ₈₁ B _{13.5} Si _{3.5} C ₂ + ¹⁹⁷ Au 11.1МэВ/нуклон	≈ 8.5	≈ 7.3	7.0 ± 0.3
Fe ₄₀ Ni ₄₀ B ₂₀ + ¹⁹⁷ Au 11.1МэВ/нуклон	≈ 9.0	≈ 7.6	7.3 ± 0.3

4. Заключение

В работе на основе модели термического пика получены результаты численного исследования температур электронного газа и кристаллической решётки в аморфных сплавах железа при облучении ионами ¹⁵²Sm 11.1МэВ/нуклон, ¹⁹⁷Au 11.1МэВ/нуклон и ²³⁸U 8.2МэВ/нуклон с учётом фазовых переходов. По результатам вычислительных экспериментов можно сделать следующие выводы:

1. При учёте фазовых переходов значительное количество энергии поглощается в точке плавления, соответственно уменьшаются температура мишени и размер расплавленной области.

2. Полученные результаты достаточно хорошо согласуются с экспериментальными данными [1], причём это согласие улучшается при учёте фазовых переходов.

Литература

1. Morphology of Swift Heavy Ion Tracks in Metallic Glasses / M. D. Rodriguez, B. Afra, C. Trautmann et al. // *Journal of Non-Crystalline Solids*. — 2012. — Pp. 571–576.
2. Распыление твёрдых тел под действием тяжёлых ионов и температурные эффекты в электронной и решёточной подсистемах / И. В. Амирханов, А. Ю. Дидык, И. В. Пузынин и др. // *Физика элементарных частиц и атомного ядра*. — 2006. — Т. 37, № 6. — С. 1592–1644. [Sputtering of Solids by Heavy Ions and Temperature Effects in the Electronic and Lattice Subsystems / I. V. Amikhanov, A. Yu. Didyk, I. V. Puzynin et al. // *PEPAN*. — 2006. — Vol. 37, No 6. — Pp. 1592–1644. — (in russian).]
3. *Yavlinskii Y.* Track Formation In Amorphous Metals Under Swift Heavy Ion Bombardment // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B*. — 1998. — Vol. 146, No 1–4. — Pp. 142–146.
4. Численное моделирование динамики температурных полей на плоских мишенях при нестационарном интенсивном лазерном воздействии / М. П. Галанин, И. С. Ерхов, Е. Ю. Локтионов и др. // *Препринт ИПМ им. М.В. Келдыша РАН*. — 2008. — № 61. [Numerical Modeling of Temperature Fields on a Flat Target at Unsteady Intense Laser Pulses / M. P. Galanin, I. S. Erhov, E. Yu. Loktionov et al. // *Preprint IPM im. M.V. Keldisha RAN*. — 2008. — No 61. — (in russian).]
5. *Самарский А. А., Гулин А. В.* Численные методы. — М.: Наука, 1989. — 432 с. [Samarskiy A. A., Gulin A. V. *Numerical Methods*. — Moscow: Nauka. — 1989. — 432 p. — (in russian).]

UDC 519.624.3

Modeling the Track Formation in Amorphous Iron Alloys Exposed to High-Energy Heavy Ions

I. V. Amirkhanov*, A. Yu. Didyk[†], I. V. Puzynin*,
T. P. Puzynina*, N. R. Sarker*, I. S. Sarkhadov*,
Z. K. Tukhliev*, Z. A. Sharipov*

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

[†] *Flerov Laboratory of Nuclear Reactions
Joint Institute for Nuclear Research
6, Joliot-Curie str., Dubna, Moscow region, Russia, 141980*

An important process in the fundamental radiation in solid state physics and in applications is the process of the track formation at irradiates by high-energy heavy ions of different in their physical and chemical properties materials. The development of modern methods of analysis and studies of the structure of extended defects stimulates initiation of new experimental and theoretical research in this area. In the experimental work the track diameters 11.1 MeV/amu ion ^{132}Xe , ^{152}Sm , ^{197}Au and 8.2 MeV/amu ^{238}U ions in a number of amorphous alloys of iron and boron were measured using a small angle scattering of synchrotron radiation. In this work, a three-dimensional model of the thermal spike modified with phase transitions of the fusion was introduced and used to estimate the diameter of tracks all of the above ion-target combinations whose values were compared with experimental data. Accounting to the phase transitions made in this work to evaluate the tracks diameters significantly improves the agreement of the simulation results with experimental data.

Key words and phrases: modeling, numerical methods, phase transitions, thermal spike model, track.