

P11-2007-106

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

ИССЛЕДОВАНИЕ ТЕМПЕРАТУРНЫХ ЭФФЕКТОВ
В МОДЕЛИ ТЕРМИЧЕСКОГО ПИКА
В ВЫСОКООРИЕНТИРОВАННОМ ПИРОЛИТИЧЕСКОМ
ГРАФИТЕ ПРИ ОБЛУЧЕНИИ ТЯЖЕЛЫМИ ИОНАМИ
 ^{86}Kr И ^{209}Bi ВЫСОКИХ ЭНЕРГИЙ

Направлено на VI Национальную конференцию по применению
рентгеновского, синхротронного излучений нейтронов и электронов для
исследования материалов (РСНЭ-2007), Москва, 12–17 ноября 2007 г.

Исследование температурных эффектов в модели термического пика в высокоориентированном пиролитическом графите при облучении тяжелыми ионами ^{86}Kr и ^{209}Bi высоких энергий

Выполнены исследования температурных эффектов в анизотропном материале — высокоориентированном пиролитическом графите (ВОПГ) при облучении тяжелыми ионами ^{86}Kr (253 МэВ) и ^{209}Bi (710 МэВ) в рамках трехмерной модели термического пика. Проведены исследования температурных эффектов в модели при изменении коэффициента электрон-фононного взаимодействия g . Показано, что в случае облучения ВОПГ ионами висмута температура на поверхности мишени может превышать температуру плавления и даже температуру испарения при значениях константы электрон-фононного взаимодействия $g \geq 1,5g_k$, где $g_k = 3,12 \cdot 10^{12}$ Вт/(см³·К). При облучении ВОПГ ионами криптона с энергией 253 МэВ температура на поверхности мишени не превышает температуру плавления при значениях коэффициента электрон-фононного взаимодействия $g \leq 4,5g_k$. Используя экспериментальные данные по изменениям структуры поверхности монокристалла ВОПГ, облученного ионами ^{209}Bi (710 МэВ) и ^{86}Kr (253 МэВ), на основании расчетов можно сделать вывод о наличии структур типа кратеров на поверхности ВОПГ при облучении ионами ^{209}Bi и их отсутствии в случае облучения ионами ^{86}Kr благодаря развитой в данной работе модели термического пика, которая позволяет объяснить данные отличия при значениях коэффициента электрон-фононного взаимодействия, удовлетворяющих двойному неравенству: $1,5g_k \leq g \leq 4,5g_k$. Сделаны вычисления максимальных размеров области в ВОПГ при облучении ионами висмута, в пределах которой температура превышает температуру плавления ВОПГ.

Работа выполнена в Лаборатории информационных технологий ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна, 2007

Temperature Effect Studies in Frame of Thermal Spike Model at Highly Oriented Pyrolytic Graphite under Irradiation with ^{86}Kr and ^{209}Bi High-Energy Heavy Ions

The studies of temperature effects in anisotropic material — highly oriented pyrolytic graphite (HOPG) under irradiation with ^{86}Kr (253 MeV) and ^{209}Bi (710 MeV) heavy ions in frame of three dimensional thermal spike model were carried out. The temperature effects versus the changes of electron-phonon interaction coefficients g are considered this model. It was shown that the surface temperature of HOPG target under irradiation with ^{209}Bi ions can be higher than melting temperature or evaporation temperature of HOPG if the values of electron-phonon interaction coefficient g satisfy the inequality $g \geq 1.5g_k$, where $g_k = 3.12 \cdot 10^{12}$ W/(cm³ · K). Surface temperature of HOPG under irradiation with ^{86}Kr ions is less than melting temperature if the values of electron-phonon interaction coefficient g satisfy the inequality $g \leq 4.5g_k$. It is possible to conclude, using made calculations and experimental data from surface structure studies of single crystal HOPG after irradiation with ^{209}Bi (710 MeV) and ^{86}Kr (253 MeV), that developed in this work thermal spike model allows one to explain the creation of crater like structures after ^{209}Bi ion irradiation and absence such structures in the case of ^{86}Kr ion irradiation. Such experimental data can take place if electron-phonon interaction coefficients g satisfy the inequality $1.5g_k \leq g \leq 4.5g_k$. The estimations of maximum sizes of volume in HOPG under irradiation with bismuth ions where temperature can be higher than melting temperature are made.

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

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna, 2007

ВВЕДЕНИЕ

В течение последних десятилетий большое внимание привлекают научно-исследовательские работы по изучению малоразмерных структур, обладающих уникальными свойствами, например, «квантовые точки» (гетероструктуры [1, 2] с пространственным ограничением заряда по всем трем измерениям) и другие наноструктуры. Такие исследования пользуются популярностью практически во всех центрах по изучению физики твердого тела. Значительное развитие получили также работы, связанные с получением наноструктур в материалах при воздействии на них ускоренных тяжелых ионов различных энергий (см., например, [3, 4]).

Отметим, что до настоящего времени далеко не ясны механизмы взаимодействия тяжелых ускоренных ионов с твердыми телами [5, 6], несмотря на достаточно продолжительное время, в течение которого такие работы проводятся (см., например, [7, 8] и цитированную там литературу). Существующие модели для изучения наблюдаемых эффектов при воздействии ускоренных заряженных частиц на материалы, такие как термический пик [9–14], кулоновский взрыв [15, 16], двойной электрический слой, модель двухкомпонентной плазмы с холодными ионами и горячими электронами [17] или их комбинации, даже для структур одного класса иногда не могут объяснить происходящие процессы.

Одним из направлений в наноразмерных исследованиях и технологиях является создание структур на основе углерода, например, фуллеренов — структур, представляющих собой сферическое образование из 60 атомов углерода (C_{60}), углеродные нанотрубки и др. К углеродным структурам, представляющим значительный интерес, относится и высокоориентированный пиролитический графит (ВОПГ) [18]. Изучение этого объекта при воздействии на него тяжелых ионов может дать важную информацию о процессах взаимодействия таких частиц с сильно неоднородной структурой — квазиодномерными монокристаллами ВОПГ. Схематическая структура ВОПГ представлена на рис. 1. Видно, что параметры решетки вдоль плотноупакованных плоскостей и между плоскостями значительно различаются, вследствие чего теплопроводность ВОПГ отличается вдоль этих взаимно-перпендикулярных направлений до 300 раз. Интерес к таким задачам обусловлен проводящимися исследованиями в области радиационной физики конденсированных сред и направлен на

изучение изменений свойств материалов при облучении, при высокодозной ионной имплантации, в современных нанотехнологиях, а также важен для развития существующих моделей, описывающих взаимодействия заряженных частиц с материалами [19–27], и разработки эффективных численных схем и алгоритмов для решения уравнений математической физики, формулируемых при создании и модификации существующих моделей для решения вышеуказанных задач.

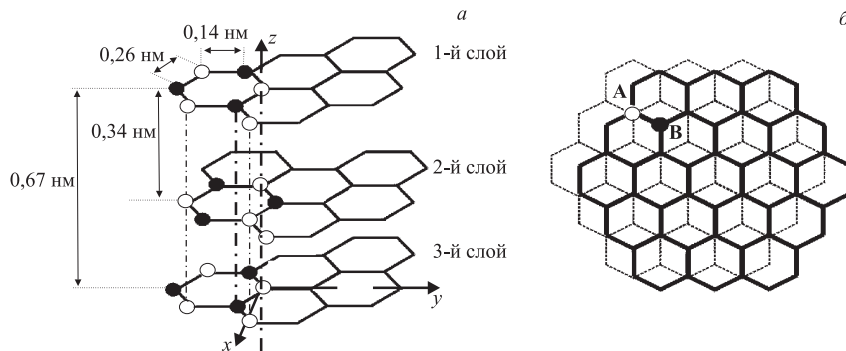


Рис. 1. Схемы слоевой структуры ВОПГ: *a* — вид сбоку; *b* — вид сверху

Целью настоящей работы является численное исследование тепловых процессов в ВОПГ при облучении ионами висмута с энергией 710 МэВ и ионами криптона с энергией 253 МэВ в рамках модели термического пика [19, 23, 25, 28–31].

1. МОДЕЛЬ ТЕРМИЧЕСКИХ ЭФФЕКТОВ В ВОПГ ПРИ ОБЛУЧЕНИИ ИОНАМИ

Для анизотропных материалов с учетом аксиальной симметрии система уравнений для определения решеточной и электронной температур (модель термического пика) в цилиндрической системе координат в трехмерном случае может быть записана в виде [19, 23, 25, 28–31]

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

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

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. Здесь $T_e(r, z, t)$ и $T_i(r, z, t)$ — температуры в электронной и решеточной подсистемах, $C_e(T_e)$, $C_i(T_i)$ и $\lambda_e(T_e)$, $\lambda_i^{\parallel, \perp}(T_i)$ — соответственно удельные теплоемкости и теплопроводности электронов и решетки, в общем случае зависящие от температуры. В данной работе значения этих теплофизических параметров выбираются равными их значениям при комнатной температуре. Символы « \parallel » и « \perp » означают, что теплопроводность зависит от направления, а именно: вдоль и перпендикулярно к поверхности. $g(T_e)$ — коэффициент, характеризующий взаимодействия электронной подсистемы с решеткой (в общем случае зависящий от температуры электронного газа). Функция $A(r, z, t)$ — объемная плотность вносимой ионом мощности. Она может быть представлена в виде наиболее часто используемого выражения, введенного в работах [32, 33]:

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

где $t_0 \simeq (1-5) \cdot 10^{-15}$ с — время достижения электронами равновесного распределения, т.е. время свободного пробега δ -электронов со средней энергией $\bar{\epsilon}_e$; полуширина распределения по времени t принята равной $\sigma_t = t_0$ [25]. Скорость экспоненциального спада, или пространственная ширина высоковозбужденной области, $r_0 \leq 2,5$ нм [32] и $r_0 \simeq 1$ нм [33]. $S_{\text{inel}}(z)$ — зависимость удельных ионизационных потерь энергии ионов от глубины в мишени. Она рассчитана по наиболее часто используемой компьютерной программе SRIM-2003 и приведена ниже для ионов висмута (рис. 2, а) и для ионов криптона (рис. 2, б).

Нормирующий множитель b определяется из условия нормировки

$$\int_0^\infty dt \int_0^{r_m} 2\pi r A(r, z, t) dr = S_{\text{inel}}(z);$$

начальные условия запишем в следующем виде:

$$T_{e,i}(r, z, 0) = T_0 = 300 \text{ К}, \quad (3)$$

а граничные условия могут быть представлены как

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial T_{e,i}(r, z, t)}{\partial r} \right|_{r=0} &= 0, & \left. \frac{\partial T_{e,i}(r, z, t)}{\partial z} \right|_{z=0} &= 0, \\ T_{e,i}(R_{\text{max}}, z, t) &= T_{e,i}(r, Z_{\text{max}}, t) = T_0. \end{aligned} \quad (4)$$

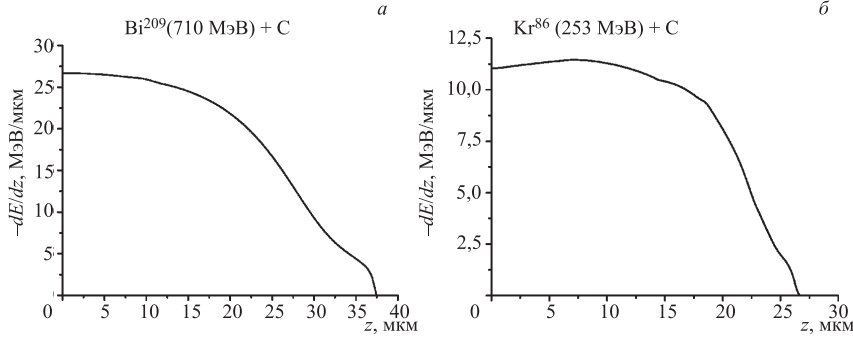


Рис. 2. Зависимость удельных ионизационных потерь энергии $S_{\text{inel}}(z) = -(\partial E/\partial z)_{\text{inel}}$ ионов висмута ^{209}Bi с энергией 710 МэВ (а) и ионов криптона ^{86}Kr с энергией 253 МэВ (б) от глубины в ВОПГ

В (4) R_{max} — радиус удаления от траектории иона, а Z_{max} — глубина, превышающая длину проективного пробега иона, при которых решетку можно считать невозмущенной, а ее температуру при $r > R_{\text{max}}$ и $z > Z_{\text{max}}$ 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.

Физические параметры системы для кристаллической решетки ВОПГ (рис. 1) при комнатной температуре $T = 300$ К [18, 34–36] приведены в табл. 1.

В работах [19, 23] было предложено следующее выражение для вычисления коэффициента электрон-фононного взаимодействия g :

$$g = \frac{\pi^2 m_e S^2 n}{6\tau_0 T_D},$$

где T_D — температура Дебая; τ_0 — время свободного пробега электронов при $T = T_D$; S — скорость звука; n — число свободных электронов в единице объема; m_e — масса электрона, или в следующем виде:

$$g = \frac{\pi^4 (k_B n S)^2}{18\lambda_e(T_e)},$$

где $\lambda_e(T_e)$ — теплопроводность электронного газа; k_B — постоянная Больцмана. Из последней формулы видно, что коэффициент взаимодействия g за-

Таблица 1. Параметры ВОПГ и энергетические потери ионов на входе в мишень

Теплоемкость электронного газа	$C_e(T_0) = 3,73 \cdot 10^{-2} \text{ Дж}/(\text{см}^3 \cdot \text{К})$
Теплопроводность электронного газа	$\lambda_e^\perp(T_0) = 5,60 \text{ Вт}/(\text{см} \cdot \text{К});$ $\lambda_e^\parallel(T_0) = 5,60 \cdot 10^{-3} \text{ Вт}/(\text{см} \cdot \text{К})$
Теплоемкость кристаллической решетки	$C_i(T_0) = 1,60 \text{ Дж}/(\text{см}^3 \cdot \text{К})$
Теплопроводность кристаллической решетки	$\lambda_i^\perp(T_0) = 20 \text{ Вт}/(\text{см} \cdot \text{К});$ $\lambda_i^\parallel(T_0) = 5,7 \cdot 10^{-2} \text{ Вт}/(\text{см} \cdot \text{К})$
Энергетические потери при входе в ВОПГ для ионов висмута с энергией 710 МэВ	$S_{\text{inel}}^{\text{Bi}}(Z=0) = 4,4 \cdot 10^{-8} \text{ Дж}/\text{см}$
Энергетические потери при входе в ВОПГ для ионов криптона с энергией 253 МэВ	$S_{\text{inel}}^{\text{Kr}}(Z=0) = 1,84 \cdot 10^{-8} \text{ Дж}/\text{см}$

висит от теплопроводности электронного газа, т. е. также зависит от направления. При подстановке значений $\lambda_e^\perp(T_e)$ и $\lambda_e^\parallel(T_e)$ в последнюю формулу получим следующие значения:

$$g(\lambda_e^\perp) = 3,12 \cdot 10^{12} \text{ Вт}/(\text{см}^3 \cdot \text{К}) \text{ и } g(\lambda_e^\parallel) = 3,12 \cdot 10^{15} \text{ Вт}/(\text{см}^3 \cdot \text{К}).$$

Так как параметр g зависит от направления, задачу будем решать при различных значениях этого параметра в отрезке $g(\lambda_e^\perp) \leq g \leq g(\lambda_e^\parallel)$.

2. МЕТОД ЧИСЛЕННОГО РЕШЕНИЯ

При решении системы уравнений (1)–(4) целесообразно ввести безразмерные переменные, а именно: $\tilde{T}_e = T_e/T_0$, $\tilde{T}_i = T_i/T_0$, $\tilde{r} = r/\Delta r$, $\tilde{z} = z/\Delta z$, $\tilde{t} = t/\Delta t$, где Δr , Δz и Δt — 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 α_1 , α_2 — произвольные безразмерные константы. Значения этих констант положим равными: $\alpha_1 = \alpha_2 = 100$. Тогда систему уравнений (1)–(2) можно записать в виде (верхние значки над безразмерными величинами опущены)

$$\frac{\partial T_e}{\partial t} = k_e^\perp \left\{ \frac{1}{r} \frac{\partial T_e}{\partial r} + \frac{\partial^2 T_e}{\partial r^2} \right\} + k_e^\parallel \frac{\partial^2 T_e}{\partial z^2} - gg_e(T_e - T_i) + A(r, z, t), \quad (5)$$

$$\frac{\partial T_i}{\partial t} = k_i^\perp \left\{ \frac{1}{r} \frac{\partial T_i}{\partial r} + \frac{\partial^2 T_i}{\partial r^2} \right\} + k_i^\parallel \frac{\partial^2 T_i}{\partial z^2} + gg_i(T_e - T_i), \quad (6)$$

где

$$A(r, z, t) = A_0^m \exp(-\alpha_1^2(t - 0,05)/2) \exp(-\alpha_2 r) \mu^m(z).$$

Начальные и граничные условия (3)–(4) записываются в виде

$$T_\beta(t, z, 0) = 1; \quad \left. \frac{\partial T_\beta}{\partial r} \right|_{r=0} = 0; \quad \left. \frac{\partial T_\beta}{\partial z} \right|_{z=0} = 0; \quad (7)$$

$$T_\beta(R_{\max}, z, t) = 1; \quad T_\beta(r, Z_{\max}, t) = 1, \quad (8)$$

$$\text{где } k_\beta^{\perp, \parallel} = \frac{\lambda_\beta^{\perp, \parallel}(T_0) \alpha_1 t_0}{C_\beta (\alpha_1 t_0)^2}, \quad g_\beta = \frac{\alpha_1 t_0}{C_\beta}, \quad \mu^{\text{Kr, Bi}} = \frac{S_{\text{inel}}^{\text{Kr, Bi}}(z)}{S_{\text{inel}}^{\text{Kr, Bi}}(0)},$$

$$A_0^{\text{Kr, Bi}} = \frac{b S_{\text{inel}}^{\text{Kr, Bi}}(0) \alpha_1 t_0}{C_e T_0}, \quad \beta = i, e.$$

Приведенные безразмерные коэффициенты принимают значения $k_e^\perp \simeq 0,15$, $k_e^\parallel \simeq 1,5 \cdot 10^{-4}$, $k_i^\perp \simeq 1,25 \cdot 10^{-2}$, $k_i^\parallel \simeq 3,56 \cdot 10^{-5}$, $g_e \simeq 8,35$, $g_i \simeq 0,19$, $A_0^{\text{Bi}} \simeq 2,5 \cdot 10^6$, $A_0^{\text{Kr}} \simeq 1,04 \cdot 10^6$, $R_{\max} = 0,5$, $Z_{\max} = 400$.

Для численного решения системы (5)–(8) будем использовать явную двух-слойную конечно-разностную схему порядка аппроксимации $O(h_t + h_r^2 + h_z^2)$ [37–39].

Для проверки сходимости разностных схем проводился численный анализ решений при фиксированных шагах h_r , h_t и на сгущающейся сетке по z , т. е. h_z , $h_z/2$, $h_z/4$ ($h_r = 5 \cdot 10^{-3}$, $h_z = 3 \cdot 10^{-2}$, $h_t = 3 \cdot 10^{-6}$). Ниже представлены результаты анализа в точке $r = 0$, $z = 0$:

$$\max_{0 \leq t \leq 0,3} \left| T_{h_z}^e(0, 0, t) - T_{h_z/2}^e(0, 0, t) \right| = 8,3 \cdot 10^{-4} \text{ при } t = 0,075;$$

$$\max_{0 \leq t \leq 0,3} \left| T_{h_z/2}^e(0, 0, t) - T_{h_z/4}^e(0, 0, t) \right| = 3,17 \cdot 10^{-4} \text{ при } t = 0,074;$$

$$\max_{0 \leq t \leq 0,3} \left| T_{h_z}^e(0, 0, t) - T_{h_z/2}^e(0, 0, t) \right| = 6,32 \cdot 10^{-5} \text{ при } t = 0,029;$$

$$\max_{0 \leq t \leq 0,3} \left| T_{h_z/2}^e(0, 0, t) - T_{h_z/4}^e(0, 0, t) \right| = 2,1 \cdot 10^{-5} \text{ при } t = 0,029.$$

Как видно, найденные разности профилей температур на сгущающейся сетке уменьшаются, что свидетельствует об устойчивости схемы вычислений. Дальнейшие вычисления проводились при значениях шагов $h_r = 5 \cdot 10^{-3}$, $h_z = 3 \cdot 10^{-2}$, $h_t = 3 \cdot 10^{-6}$.

3. ОБСУЖДЕНИЕ ПОЛУЧЕННЫХ РЕЗУЛЬТАТОВ

При решении системы уравнений (1)–(4) были проанализированы временные и координатные зависимости температур электронного газа $T_e(r, z, t)$ и решетки $T_i(r, z, t)$ ВОПГ при облучении ионами висмута и криптона.

На рис. 3 представлены зависимости от времени температур решетки на поверхности ВОПГ при облучении ионами висмута и криптона при разных значениях коэффициента электрон-фононного взаимодействия g . Из этих рисунков видно, что, начиная со значения параметра $g \approx 1,5g_k$, температура на поверхности ВОПГ при облучении ионами висмута может превышать температуру плавления. Этот же процесс при облучении ВОПГ ионами криптона начинается с существенно большего значения константы $g \approx 4,5g_k$.

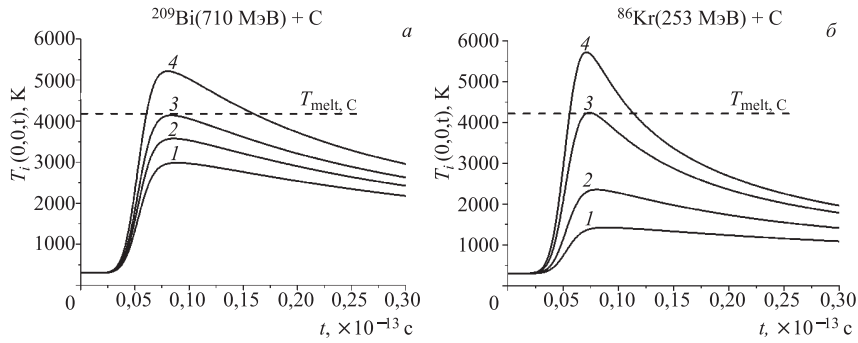


Рис. 3. Временные зависимости температуры кристаллической решетки на поверхности пирогрфита при облучении ионами висмута (а) и криптона (б) при разных значениях коэффициента взаимодействия (для висмута: 1 — $g_k = 3,12 \cdot 10^{12}$, 2 — $g = 1,25g_k$, 3 — $g = 1,5g_k$, 4 — $g = 2g_k$; для криптона: 1 — $g_k = 3,12 \cdot 10^{12}$, 2 — $g = 2g_k$, 3 — $g = 4,5g_k$, 4 — $g = 7g_k$; штриховой линией обозначена температура плавления ВОПГ). Здесь и ниже «С» обозначает ВОПГ (carbon)

Основные экспериментальные данные [31, 34, 35] при облучении ВОПГ ионами висмута и криптона следующие:

1. При облучении ионами висмута вблизи поверхности ВОПГ (ионизационные потери энергии $S_{inel}^{Bi}(z \approx 0) = 27,6$ кэВ/нм) методами сканирующей туннельной микроскопии были обнаружены структурные изменения, представляющие собой кратеры с глубиной $H_{cr} > 1$ нм и диаметром на поверхности $D_{cr} \approx 5-7$ нм, поверхностная плотность которых примерно на порядок меньше плотности облучения ионами висмута [31, 34, 35]. Такие структуры, по-видимому, обусловлены термофлуктуационными эффектами при потерях энергии ионов висмута на ионизацию на входе в мишень ВОПГ. Это свидетельствует о том, что эти потери сравнимы с пороговыми значениями ионизационных потерь энергии ($S_{inel}^{Bi}(z = 0) \propto S_{inel}^{Threshold}$) для возникнове-

ния перегретой области вблизи поверхности с температурой выше температур плавления ($T_i^{\text{Bi}}(z \propto 0) \geq T_{\text{melt,C}}$ при значении константы $g \geq 1,5g_k$ (см. рис. 3, а, кривая 3)) или даже испарения ($T_i^{\text{Bi}}(z \propto 0) > T_{\text{subl,C}}$) ВОПГ. Поэтому обнаруженные структуры (кратеры) могут быть объяснены в рамках модели термического пика за счет резкого увеличения коэффициентов испарения атомов графита с поверхности в области трека иона висмута с высокими температурами вблизи поверхности.

2. При облучении ионами криптона подобных структурных изменений на поверхности ВОПГ обнаружено не было. Отметим, что ионизационные потери энергии ионов криптона вблизи поверхности более чем в два раза меньше, чем для ионов висмута ($S_{\text{inel}}^{\text{Kr}}(z \propto 0) = 12$ кэВ/нм). Поэтому при облучении ионами криптона, по-видимому, $S_{\text{inel}}^{\text{Kr}}(z = 0) < S_{\text{inel}}^{\text{Threshold}}$ и соответственно $T_i^{\text{Kr}}(z \propto 0) < T_{\text{melt,C}}$.

Исходя из результатов, представленных на рис. 3 для ВОПГ, облученного ионами криптона ($T_i^{\text{Kr}}(z \propto 0) < T_{\text{melt,C}}$ (см. рис. 3, б, кривая 3)) и висмута ($T_i^{\text{Bi}}(z \propto 0) \geq T_{\text{melt,C}}$), константа электрон-фононного взаимодействия должна удовлетворять двойному неравенству $1,5g_k \leq g \leq 4,5g_k$.

На рис. 4 показана зависимость максимального радиуса области, где температура решетки может превышать температуру плавления ВОПГ, от значений константы электрон-фононного взаимодействия g при облучении ВОПГ ионами висмута и криптона. Из этих рисунков видно, что при увеличении константы g размер максимальной области сначала быстро растет, но постепенно стабилизируется и выходит на насыщение.

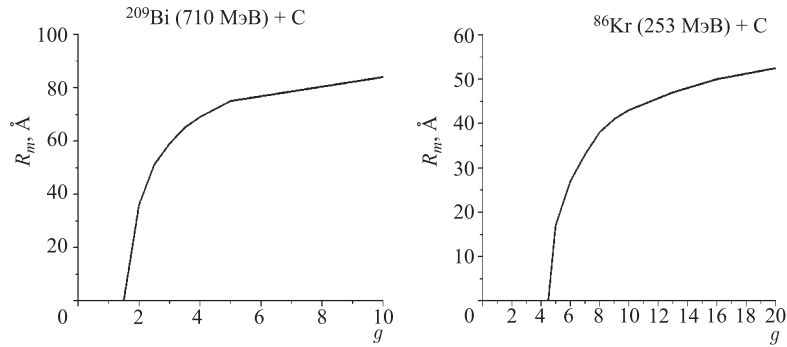


Рис. 4. Зависимость максимального радиуса области, где температура превышает температуру плавления ВОПГ, от значений параметра g при облучении ионами висмута и криптона

Это свидетельствует о том, что, начиная с некоторого значения параметра g , максимальный диаметр «расплавленной» области или, что более точно, области, нагретой до температуры выше температуры плавления, не будет расти, т. е. представленная модель не противоречива и адекватно описывает

явления при прохождении высокоионизирующих ионов через квазиодномерную структуру ВОПГ. В дальнейших представленных рисунках значение параметра g взято в виде $g = 2g_k$.

На рис. 5, 6 представлены зависимости от времени температуры электронного газа и решетки на поверхности ВОПГ при облучении ионами висмута и ионами криптона для разных расстояний от оси OZ . Из этих рисунков видно, что при облучении висмутом, начиная со времени $t = 0,062 \cdot 10^{-13}$ с, температура превышает температуру плавления пирографита, а при облучении криптоном температура мишени не доходит до температуры плавления пирографита.

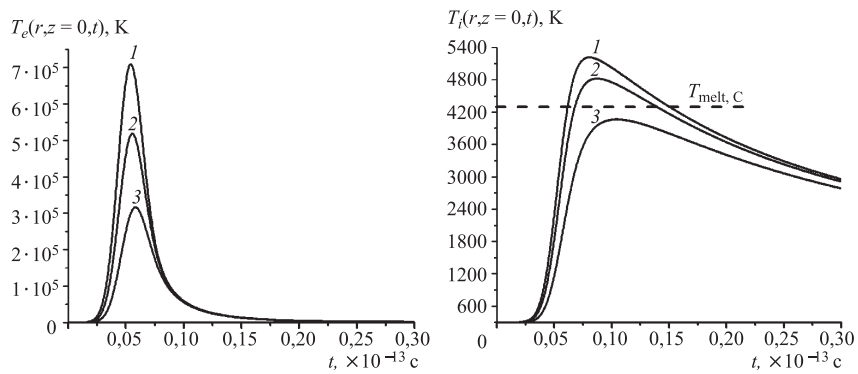


Рис. 5. Временная зависимость температур электронного газа и кристаллической решетки на поверхности ВОПГ при облучении ионами висмута от расстояний до оси трека иона при значениях 1 — $r = 0$; 2 — $r = 20$; 3 — $r = 40$ Å. Штриховой линией обозначена температура плавления ВОПГ

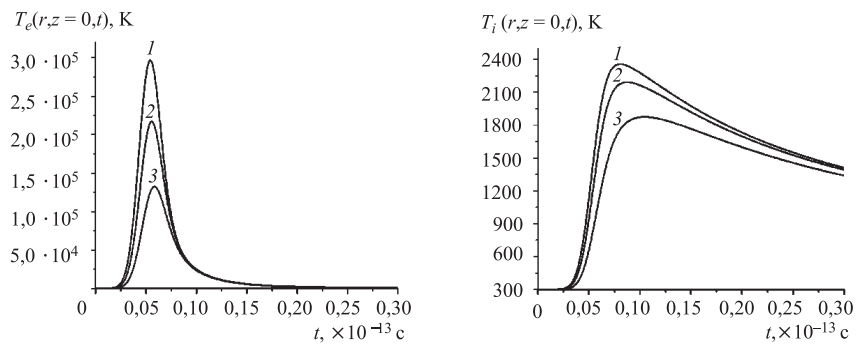


Рис. 6. Временные зависимости температур электронного газа и кристаллической решетки на поверхности ВОПГ при облучении ионами криптона от расстояний до оси трека при значениях 1 — $r = 0$; 2 — $r = 20$; 3 — $r = 40$ Å

На рис. 7 представлена временная динамика изменений изотермической поверхности — поверхности, где температура равна температуре плавления ВОПГ при облучении ионами висмута.

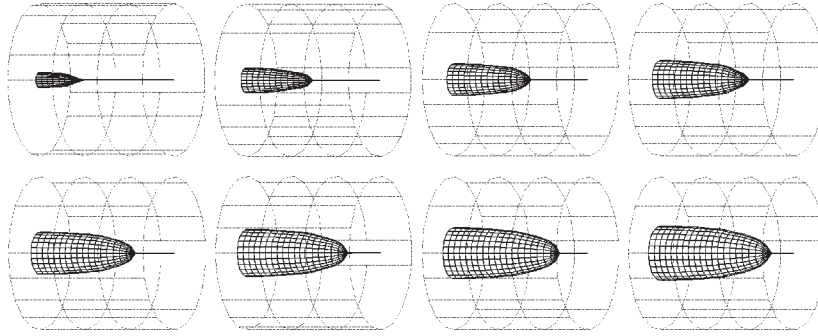


Рис. 7. Динамика движения изотермической поверхности, т. е. поверхности, где температура равна температуре плавления ВОПГ, при облучении ионами висмута на временном интервале $\Delta t = 6,0 \cdot 10^{-15} - 8,4 \cdot 10^{-15}$ с (размеры цилиндра: диаметр $D = 100 \text{ \AA}$ при глубине $Z = 2,1 \cdot 10^5 \text{ \AA}$)

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе на основе линейной двухтемпературной модели термического пика получены результаты численного анализа температур электронного газа и кристаллической решетки при облучении монокристаллического высокоориентированного пиролитического графита ионами висмута с энергией 710 МэВ и ионами криптона с энергией 253 МэВ. Выполнен анализ точности схемы вычислений и показано, что схема устойчива. Проведены исследования температурных эффектов в модели в зависимости от коэффициента электрон-фононного взаимодействия g .

1. Показано, что в случае облучения ВОПГ ионами висмута с энергией 710 МэВ температура на поверхности мишени может превышать температуру плавления и даже температуру испарения-возгонки при значениях константы электрон-фононного взаимодействия $g \geq g_3 = 1,5g_k$, где $g_k = 3,12 \cdot 10^{12} \text{ Вт/(см}^3 \cdot \text{К)}$ (см. рис. 3, а).
2. При облучении ВОПГ ионами криптона с энергией 253 МэВ температура на поверхности мишени не превышает температуру плавления при значениях коэффициента электрон-фононного взаимодействия $g \leq g_3 = 4,5g_k$ (см. рис. 3, б).

3. Исходя из экспериментальных данных по изучению изменений структуры поверхности монокристалла ВОПГ, облученного ионами висмута с энергией 710 МэВ и криптона с энергией 253 МэВ [27, 34, 35], на основании расчетов можно сделать вывод, что для объяснения наличия структур типа кратеров (с глубиной $H_{cr} > 1$ нм и диаметром на поверхности $D_{cr} \approx 5-7$ нм) на поверхности ВОПГ при облучении ионами висмута и их отсутствия в случае облучения ионами криптона можно использовать развитую в данной работе модель термического пика, которая позволяет объяснить данные отличия при значениях коэффициента электрон-фононного взаимодействия, удовлетворяющих двойному неравенству $1,5g_k \leq g \leq 4,5g_k$.

Максимальный размер области в ВОПГ при облучении ионами висмута, в которой температура вблизи поверхности превышает температуру плавления, равен $D_{max}^{melt} \simeq 60 \text{ \AA}$, $Z_{max}^{melt} \simeq 203 \cdot 10^3 \text{ \AA}$ (D_{max}^{melt} — оценка максимального диаметра и Z_{max}^{melt} — оценка максимальной глубины, где может происходить плавление). Расчетные данные получены при значении коэффициента электрон-фононного взаимодействия $g \approx 2,0g_k = 6,24 \cdot 10^{12} \text{ Вт/(см}^3 \cdot \text{К)}$.

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

ЛИТЕРАТУРА

1. *Alferov Zh. I.* // Proc. of Nobel Symposium 99, Arild, Sweden, June 4–8, 1996; Physica Scripta 1996. V. 68. P. 32; *Алферов Ж. И.* // ФТП. 1998. Т. 32, № 1. С. 1.
2. *Леденцов Н. Н. и др.* Гетероструктуры с квантовыми точками: получение, свойства, лазеры. Обзор // ФТП. 1998. Т. 32, № 4. С. 385–410.
3. *Михушкин В. М., Сысоев С. Е., Гордеев Ю. С.* Создание наноструктур ионной бомбардировкой полупроводников и высокотемпературных сверхпроводников // Изв. РАН. Сер. физ. 2002. Т. 66, № 4. С. 588–592.
4. *Bouneau S. et al.* Very large Gold and Silver Sputtering Yields Induced by keV to MeV Au_n Gold Clusters ($n = 1 - 13$) // Phys. Rev. B (in press).
5. *Fink D., Chadderton L.* Ion-solid interactions: current status, new perspectives // Rad. Effects & Defects in Solids. 2005. V. 160, No. 3–4. P. 67–83.
6. *Мартыненко Ю. В.* Эффекты дальнего действия при ионной имплантации // Итоги науки и техники. Пучки заряженных частиц. М.: ВИНТИ, 1993. С. 82–113.
7. *Комаров Ф. Ф.* Дефектообразование и трекообразование в твердых телах при облучении ионами сверхвысоких энергий // УФН. 2003. Т. 173, № 12. С. 1287–1318.
8. *Блейхер Г. А., Кривобоков В. П., Пащенко О. В.* Тепломассоперенос в твердом теле под действием мощных пучков заряженных частиц. Новосибирск: Наука, Сибирская издательская фирма РАН, 1999. 176 с.
9. *Seitz F., Koehler J. S.* // Sol. St. Phys. 1956. V. 2. P. 251.

10. *Лифшиц И. М.* О температурных вспышках в среде, подверженной действию ядерного излучения // Докл. АН СССР. 1956. Т. 109, № 6. С. 1109–1111.
11. *Лифшиц И. М., Каганов М. И., Танатаров Л. В.* К теории релаксационных изменений в металлах // АЭ. 1959. Т. 6. С. 391–402.
12. *Каганов М. И., Лифшиц И. М., Танатаров Л. В.* Релаксация между электронами и решеткой // ЖЭТФ. 1956. Т. 31, № 2(8). С. 232–237.
13. *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.
14. *Давыдов А. А., Калинин А. И.* Механические эффекты вблизи ионных треков и термических пиков // Вопросы атомной науки и техники. Сер.: Физика радиационных повреждений и радиационное материаловедение. М., 1985. Вып. 3(36). С. 27–30.
15. *Fleisher R. L., Price P. B., Walker R. M.* // J. Appl. Phys. 1965. V. 36, No. 11. P. 3645–3652.
16. *Fleisher R. L., Price P. B., Walker R. M.* Nuclear Track in Solids. Los Angeles: University of California, 1975.
17. *Баранов И. А. и др.* Неупругое распыление твердых тел // УФН. 1988. Т. 156, № 3. С. 477–510.
18. *Фиалков А. С.* Углерод, межслоевые соединения и композиты на его основе. М.: Аспект пресс, 1997. 505 с.
19. *Wang Z. G. et al.* The Se sensitivity of metals under swift-heavy-ion irradiation: a transient thermal process // J. Phys.: Condens. Matter. 1994. V. 6, No. 34. P. 6733–6750.
20. *Toulemonde M.* Nanometric phase transformation of oxide materials under GeV energy heavy ion irradiation // Nucl. Instr. Meth. B. 1999. V. 156, No. 1–4. P. 1–11.
21. *Neumann R.* Scanning probe microscopy of ion-irradiated materials // Nucl. Instr. Meth. B. 1999. V. 151, No. 1–4. P. 42–55.
22. *Furuno S. et al.* Tracks of high energy heavy ions in solids // Nucl. Instr. Meth. B. 1996. V. 107, No. 1–4. P. 223–226.
23. *Dufour Ch. et al.* A high-resistivity phase induced by swift heavy-ion irradiation of Bi: a probe for thermal spike damage // J. Phys.: Condens. Matter. 1993. V. 5, No. 26. P. 4573–4584.
24. *Audouard et al.* Atomic displacements and atomic motion induced by electron excitation in heavy-ion-irradiated amorphous metallic alloys // J. Phys: Condens. Matter. 1993. V. 5, No. 5. P. 995–1018.
25. *Dufour Ch., Paumier E., Toulemonde M.* // Radiat. Eff. and Defects in Solids. 1993. V. 126. P. 119.
26. *Karamian S. A., Oganessian Yu. Ts., Bugrov V. N.* The effect of high-energy ions heavier than argon on a germanium single crystal and a new mechanism for autore-crystallisation // Nucl. Instr. Meth. B. 1989. V. 43, No. 2. P. 153–158.
27. *Дидык А. Ю.* Радиационное воздействие тяжелых ионов на хромоникелевую сталь при высоких температурах // Изв. РАН. Металлы. 1995. № 3. С. 128–135.

28. Амирханов И. В. и др. Температура в двухслойных материалах вдоль проективного пробега тяжелого иона высокой энергии в модели термического пика // Письма в ЭЧАЯ. 2006. Т. 3, № 1(130). С. 63–75.
29. Амирханов И. В. и др. Применение модели термического пика для расчета температуры в двухслойных структурах вдоль проективного пробега тяжелого иона высокой энергии // Письма в ЭЧАЯ. 2006. Т. 3, № 5(134). С. 80–91.
30. Amirkhanov I. V. et al. Investigation of heat processes in materials under irradiation by swift heavy ions in frame of general thermal spike model // Crystallography Report. 2006. No. 51, Suppl.1. P. S32–S43.
31. Амирханов И. В. и др. Распыление твердых тел под действием тяжелых ионов и температурные эффекты в электронной и решеточной подсистемах // ЭЧАЯ. 2006. Т. 37, вып. 6. С. 1592–1644.
32. Waligorski M. R. P., Hamm R. N., Katz R. // Nucl. Tracks and Radiat. Meas. 1986. V. 11. P. 306–319.
33. Bitensky I. S., Dimirev P., Sundquist B. U. R. // Nucl. Instr. Meth. B. 1998. V. 82. P. 356–361.
34. Дидык А. Ю. и др. Влияние облучения ионами криптона с энергией 305 МэВ на высокоориентированный пиролитический графит // Письма в ЖТФ. 2000. Т. 26, № 17. С. 1–5.
35. Cheblukov Yu. N. et al. Surface structure changes of high oriented pyrolytic graphite under influence of swift heavy ions // J. of Advanced Materials. 2001. No. 5. P. 42–45.
36. Физические величины. Справочник / Под. ред. И. С. Григорьева, Е. З. Мейлиховой. М.: Энергоатомиздат, 1991.
37. Самарский А. А. Теория разностных схем. М.: Наука, 1983. С. 258–276.
38. Самарский А. А., Гулин А. В. Устойчивость разностных схем. М.: Наука, 1973. С. 308–338.
39. Турчак Л. И. Основы численных методов. М.: Наука, 1987. С. 277–284.

Получено 16 июля 2007 г.

Редактор *Е. В. Сабеева*

Подписано в печать 02.11.2007.

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

Усл. печ. л. 1,0. Уч.-изд. л. 1,19. Тираж 315 экз. Заказ № 55945.

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

E-mail: publish@jinr.ru

www.jinr.ru/publish/