

P11-2009-139

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

МОДИФИЦИРОВАННАЯ МОДЕЛЬ ТЕПЛОВОГО ПИКА
В МАТЕРИАЛАХ ПРИ ОБЛУЧЕНИИ
ТЯЖЕЛЫМИ ИОНАМИ ВЫСОКИХ ЭНЕРГИЙ
С ФУНКЦИЕЙ ИСТОЧНИКА,
ЗАВИСЯЩЕЙ ОТ СКОРОСТИ ИОНА

Направлено в оргкомитет конференции «РСНЭ-НБИК-2009», Москва,
16–21 ноября 2009 г.

Амирханов И. В. и др.

P11-2009-139

Модифицированная модель теплового пика в материалах при облучении тяжелыми ионами высоких энергий с функцией источника, зависящей от скорости иона

При прохождении тяжелых ионов через конденсированные среды их потери энергии в основном расходятся на упругое и неупругое взаимодействия. Компьютерная программа SRIM-2008 позволяет вычислять потери энергии тяжелых ионов при их прохождении через конденсированные среды. Для исследования большое значение имеет время от момента попадания иона в мишень до его полной остановки.

Проведенные расчеты (с использованием результатов программы SRIM-2008) показали, что время прохождения ионов урана с энергией 700 МэВ в никелевой мишени составляет $t_{\text{ион}} \approx 4 \cdot 10^{-12}$ с. В предыдущих работах не учитывалось движение иона внутри материала и выбирался источник со временем действия $t_{\text{ион}} \approx 10^{-14}$ с. В данной работе предлагается модель термического пика с новым источником, учитывающим движение иона внутри материала.

Работа выполнена в Лаборатории информационных технологий ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна, 2009

Amirkhanov I. V. et al.

P11-2009-139

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

At passage of heavy ions through condensed media, their energy losses are generally spent for 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 moment of 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 with the energy 700 MeV in a nickel target is $t_{\text{ион}} \approx 4 \cdot 10^{-12}$ s. In the previous investigations, the motion of an ion in a material was not considered and a source with the action time $t_{\text{ион}} \approx 10^{-14}$ 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.

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

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna, 2009

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, образование «треков» и изменение механических свойств материалов при облучении их тяжелыми ионами высоких энергий. Заметим, что, несмотря на довольно длительный период исследований, условия образования «треков» в твердых телах неясны в деталях до сих пор. Около пятидесяти лет назад были предложены две модели, объясняющие причины возникновения «трека» в диэлектриках, а именно модель термического пика [1–3] и механизм кулоновского взрыва [4, 5]. Модель термического пика описывается системой двух связанных уравнений в частных производных для температуры электронов T_e и решетки T_i .

В данной работе предлагается модифицированная модель термического пика, учитывающая движение иона внутри материала. Компьютерная программа SRIM-2008 [6] позволяет вычислить потери энергии тяжелых ионов при их прохождении через конденсированные среды. Большое значение для понимания имеет время от момента попадания иона в мишень до его полной остановки. Проведенные расчеты (с использованием результатов программы SRIM-2008) показали, что время прохождения ионов урана с энергией 700 МэВ в никелевой мишени составляет $t_{\text{ион}} \approx 4 \cdot 10^{-12}$ с. В предыдущих исследованиях [7, 9] не учитывалось движение иона внутри материала и предлагался источник со временем действия $t_{\text{ион}} \approx 10^{-14}$ с.

Целью настоящей работы является применение модифицированной модели термического пика для исследования тепловых процессов в никелевой мишени при облучении ионами урана с энергией $E_{\text{ион}}^0 = 700$ МэВ с источником, учитывающим движение иона внутри материала.

1. ОСНОВНЫЕ ФИЗИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ПРИ ПРОХОЖДЕНИИ ТЯЖЕЛОГО ИОНА УРАНА С ЭНЕРГИЕЙ $E_{\text{ион}}^0 = 700$ МэВ ЧЕРЕЗ НИКЕЛЕВУЮ МИШЕНЬ

Компьютерная программа SRIM-2008 позволяет вычислять следующие потери энергии тяжелых ионов при их прохождении через конденсированные среды:

- 1) неупругие потери энергии $S_{\text{inel}}(z) \equiv - \left(\frac{\partial E}{\partial z}(z) \right)_{\text{inel}}$,
- 2) упругие потери энергии $S_{\text{el}}(z) \equiv - \left(\frac{\partial E}{\partial z}(z) \right)_{\text{el}}$,
- 3) фоновые возбуждения $S_{\text{ph}}(z) \equiv - \left(\frac{\partial E}{\partial z}(z) \right)_{\text{ph}}$.

Эти потери энергии при облучении никелевой мишени ионами урана с энергией $E_{\text{ион}}^0 = 700$ МэВ и с применением компьютерной программы SRIM-2008 имеют значения

$$\Delta E_{\text{inel}} = \int_0^{R_p} S_{\text{inel}}(z) dz \approx 688,59 \text{ МэВ (98,37\%)},$$

$$\Delta E_{\text{el}} = \int_0^{R_p} S_{\text{el}}(z) dz \approx 0,21 \text{ МэВ (0,03\%)},$$

$$\Delta E_{\text{ph}} = \int_0^{R_p} S_{\text{ph}}(z) dz \approx 11,20 \text{ МэВ (1,60\%)}.$$

На рис. 1 (слева) представлена зависимость полной потери энергии $S(z) = S_{\text{inel}}(z) + S_{\text{ph}}(z) + S_{\text{el}}(z)$ иона урана с энергией $E_{\text{ион}}^0 = 700$ МэВ от глубины в никелевой мишени.

Используя эти данные, можно вычислить следующее:

- а) зависимость энергии иона от глубины в мишени

$$E(z) = E_{\text{ион}}^0 - \int_0^z S_{\text{inel}}(z) dz,$$

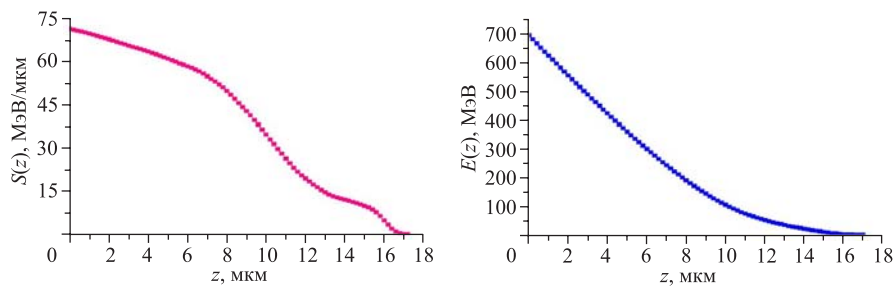


Рис. 1. Зависимость полной потери энергии $S(z)$ (слева) и энергии $E(z)$ (справа) ионов урана с энергией $E_{\text{ион}}^0 = 700$ МэВ от глубины в никелевой мишени

б) зависимость скорости иона от глубины в мишени

$$V(z) = \left(\frac{2E(z)}{M_U} \right)^{1/2},$$

где M_U — масса атома урана (в граммах). Скорость ионов урана на входе в никелевую мишень составляет

$$V_0(z=0) = \sqrt{\frac{2E(z=0)}{M_U}} = 2,37 \cdot 10^7 \text{ м/с},$$

в) зависимость от z времени от момента попадания иона в мишень до его полной остановки

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

На рис. 1 (справа) приведена зависимость энергии иона урана от глубины в мишени, а на рис. 2 — зависимость скорости (слева) и времени $t(z)$ (справа) иона урана с энергией $E_{\text{ион}}^0 = 700 \text{ МэВ}$ от глубины в никелевой мишени. Используя последнюю формулу $t(z)$, можно оценить время прохождения иона в мишени до его полной остановки $t_{\text{ион}} \approx 4 \cdot 10^{-12}$.

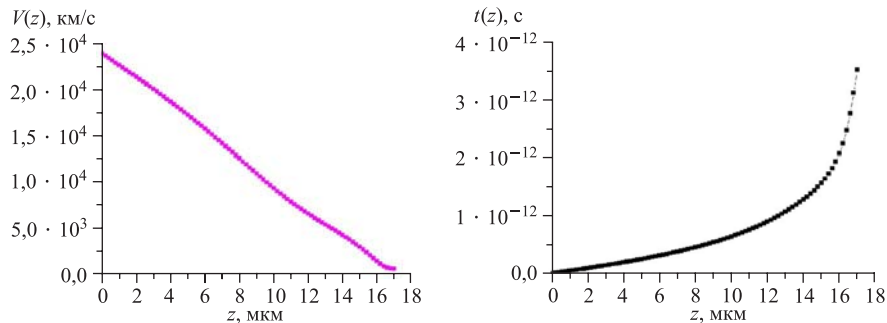


Рис. 2. Зависимость скорости $V(z)$ (слева) и времени $t(z)$ (справа) иона урана с энергией $E_{\text{ион}}^0 = 700 \text{ МэВ}$ от глубины в никелевой мишени

2. МОДЕЛЬ ТЕРМИЧЕСКОГО ПИКА

С учетом аксиальной симметрии система уравнений для определения решеточной и электронной температур в цилиндрической системе координат

может быть записана в виде [7–9]

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

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

здесь $C_{e,i}$, $\lambda_{e,i}$ — теплофизические параметры системы, g — коэффициент взаимодействия электронной и решеточной подсистем, функция $A(r, z, t)$ — объемная плотность вносимой ионом мощности (источник).

Система уравнений (1), (2) решалась со следующими начальными и граничными условиями:

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

$$\left. \frac{\partial T_{e,i}(r, z, t)}{\partial r} \right|_{r=0} = 0, \quad \left. \frac{\partial T_{e,i}(r, z, t)}{\partial z} \right|_{z=0} = 0, \quad (4)$$

$$T_{e,i}(R_{\max}, z, t) = T_{e,i}(r, Z_{\max}, t) = T_0.$$

Ранее [7, 9] источник выбирали в виде

$$A_e(r, z, t) \equiv b_e S_{\text{inel}}(z) \exp \left[-\frac{(t - t_{e0})^2}{2\sigma_{e0}^2} \right] \exp \left(-\frac{r}{r_{e0}} \right), \quad (5)$$

где r_{e0} , t_{e0} , σ_{e0} — физические константы модели.

Используя полученную выше функцию $t(z)$, источник энергии $A_e(r, z, t)$, вносимый налетающим ионом урана в электронную подсистему, запишем в следующем виде:

$$A_e(r, z, t) \equiv b_e S_{\text{inel}}(z) \exp \left[-\frac{(t - t_{e0} - t(z))^2}{2\sigma_{e0}^2} \right] \exp \left(-\frac{r}{r_{e0}} \right). \quad (6)$$

Следует заметить, что характерное время фононных колебаний с учетом их зависимостей от температуры имеет частоты $\nu_{\text{ph}} = (1 \div 3) \cdot 10^{13}$ Гц, а обратное время фононных колебаний $t_{\text{ph}} = (0,3 \div 1,0) \cdot 10^{-13}$ с меньше характерного времени прохождения иона. Источник (5) действует в мишени за время $0 < t < 10^{-14}$ с на отрезке $0 \leq z \leq Z_{\max}$. В отличие от него источник (6) действует в мишени за время $0 < t < 4 \cdot 10^{-12}$ локально в области, где находится ион, и эта область движется вместе с ионом до его остановки.

3. МЕТОД ЧИСЛЕННОГО РЕШЕНИЯ И ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Для численного решения системы уравнений (1)–(4) были использованы явная конечно-разностная схема с порядком аппроксимации $O(h_t + h_r^2 + h_z^2)$ и схема переменных направлений с таким же порядком аппроксимации [10].

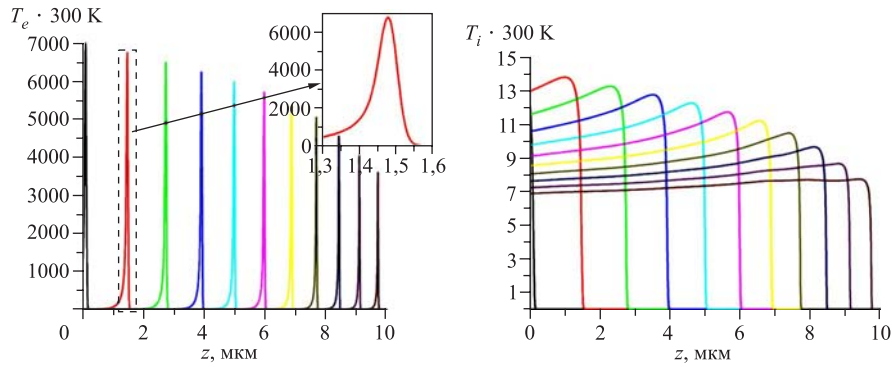


Рис. 3. Температурные зависимости от глубины мишени z электронного газа (слева) и решетки (справа) в разные моменты времени $0 < t < 4 \cdot 10^{-12}$ с шагом $h_t = 0,6 \cdot 10^{-13}$ с

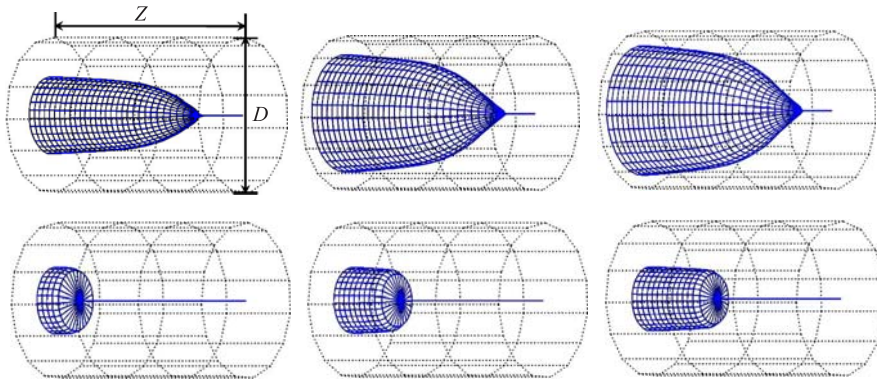


Рис. 4. Изотермическая поверхность, ограничивающая выделенный объем, в котором температура равна температуре плавления никеля, без учета движения иона (верхний рисунок) в моменты времени $t_1 = 1,2 \cdot 10^{-14}$ с, $t_2 = 1,7 \cdot 10^{-14}$ с, $t_3 = 3,0 \cdot 10^{-14}$ с и с учетом движения иона (нижний рисунок) в моменты времени $t_1 = 10^{-13}$ с, $t_2 = 2,0 \cdot 10^{-13}$ с и $t_3 = 3,0 \cdot 10^{-13}$ с. Размеры цилиндра: диаметр основания $D = 280$ Å, глубина $Z = 16,8 \cdot 10^4$ Å

На рис. 3 представлены температурные зависимости от глубины мишени для электронного газа (слева) и решетки (справа) в разные моменты времени с шагом $h_t = 0,6 \cdot 10^{-13}$ с. Из рис. 3 видно, что источник энергии действует в том месте, где находится в данное время налетающий тяжелый ион. В [9] приведены результаты исследований, когда движение иона внутри материала не учитывается. На рис. 4 для сравнительного анализа представлена изотермическая поверхность, ограничивающая 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 никеля при облучении ионами урана с энергией 700 МэВ. Выполнен численный анализ двух схем вычислений. По результатам вычислительных экспериментов можно сделать следующие выводы:

1) при использовании предложенной в данной модели функции источника (6) со временем действия $\Delta t = 4 \cdot 10^{-12}$ с тепловые процессы происходят иначе, чем при использовании функции источника (5), т. е. при учете движения иона источник действует в том месте, где находится в данное время налетающий тяжелый ион,

2) размер области, где температура превышает температуру плавления никеля, меньше относительно модели, где не учитывается движение иона: $r_{\max} \sim 62 \text{ \AA}$, $z = 0$ (рис. 4 внизу) — при учете движения иона и $r_{\max} \sim 115 \text{ \AA}$, $z = 0$ (рис. 4 вверху) — при неучете движения иона [9].

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

ЛИТЕРАТУРА

1. *Лифшиц И. М.* О термических вспышках в средах, подвергнутых ядерным облучениям // Докл. АН СССР. 1956. Т. 109, № 6. С. 1109–1111.
2. *Каганов М. И., Лифшиц И. М., Танатаров Л. В.* Теория релаксационных изменений в металлах // Атомная энергия. 1959. Т. 6. С. 391–402.
3. *Гегузин Я. Е., Каганов М. И., Лифшиц И. М.* Длина свободного пробега электрона при образовании траектории заряженной частицы в металле // ФТТ. 1973. Т. 15, № 8. С. 2425–2428.

4. *Fleisher R. L., Price P. B., Walker R. M.* Ion Explosion Spike Mechanism for Formation of Charged-Particle Tracks in Solids // *J. Appl. Phys.* 1965. V.36, No.11. P. 3645–3652.
5. *Fleisher R. L., Price P. B., Walker R. M.* Nuclear Track in Solids. Los Angeles: Univ. of California, 1975.
6. *Biersack J. P., Haggmark L. G.* A Monte Carlo Computer Program for the Transport of Energetic Ions in Amorphous Targets // *Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B.* 1980. V. 174. P. 257–269 (<http://www.srim.org>).
7. *Амирханов И. В., Дидык А. Ю., Хофман А. 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.
8. *Yavlinskii Yu. N.* Track Formation in Amorphous Metals under Swift Heavy Ion Bombardment // *Nucl. Instr. Meth. B.* 1998. V. 146. P. 142–146.
9. *Амирханов И. В., Дидык А. Ю., Земляная Е. В. и др.* Численное исследование температурных эффектов в материалах при облучении их тяжелыми ионами высоких энергий в рамках уравнений теплопроводности для электронов и решетки // *Письма в ЭЧАЯ.* 2006. Т. 3, № 1(130). С. 63–75.
10. *Самарский А. А.* Теория разностных схем. М.: Наука, 1983. С. 258–276.

Получено 14 сентября 2009 г.

Редактор *А. И. Петровская*

Подписано в печать 11.12.2009.

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

Усл. печ. л. 0,62. Уч.-изд. л. 0,74. Тираж 320 экз. Заказ № 56825.

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

E-mail: publish@jinr.ru

www.jinr.ru/publish/