

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ МОДЕЛИ ТЕРМИЧЕСКОГО ПИКА В ТРЕХМЕРНОЙ РЕШЕТКЕ ПРИ ОБЛУЧЕНИИ ТЯЖЕЛЫМИ ИОНАМИ ВЫСОКИХ ЭНЕРГИЙ

А.Ю. Дидык¹, В.Н. Робук¹, В.К. Семина¹, А. Халил², А. Хофман^{1,3}

¹*Объединенный институт ядерных исследований,*

Лаборатория ядерных реакций им. Г.Н.Флерова, г. Дубна;

²*Национальный университет Австралии, г. Канберра, Австралия;*

³*Институт атомной энергии, г. Свек, Польша*

Рассмотрена модель термического пика в материалах при облучении быстрыми тяжелыми ионами с высокими удельными неупругими потерями энергии при учете зависимости температуры вдоль траектории иона. В данной температурной модели получены численные решения системы уравнений для температур решетки и электронов при учете возможного разогрева решетки до температур плавления и испарения, т. е. с двумя фазовыми переходами. Введено давление в области трека тяжелого иона и рассмотрено его влияние на изменение термодинамических параметров решетки. Проведен численный анализ с использованием приближенных выражений для температуры решетки.

1. ВВЕДЕНИЕ

Образования треков (сильно деструктурированных областей) в различных материалах при воздействии на них тяжелых заряженных частиц, таких как осколки деления и ускоренные тяжелые ионы высоких энергий (с энергиями более 1 МэВ/а.е.м.), исследуются в течение ряда последних десятилетий [1–12].

Основными механизмами, объясняющими процессы образования треков тяжелых ионов в диэлектрических материалах, являются модели кулоновского взрыва и термического пика [13, 14]. Помимо этого, модель термического пика была эффективно использована для объяснения процессов неупругого распыления мелкодисперсных материалов [2, 3, 15, 16].

Отметим, что треком тяжелой заряженной частицы принято называть сильно деструктурированную область вблизи траектории тяжелой частицы в материале, созданную вследствие температурных эффектов, вызванных ионизационными потерями энергии тяжелой

заряженной частицы
$$\left(S_{inel} = - \left(\frac{\partial E}{\partial z} \right)_{inel} \right),$$

приводящих к расплавлению и последующей частичной (или полной) рекристаллизации этой области.

Цель настоящей работы – рассмотреть имеющуюся модель для вычисления температуры решетки (T) и электронов (T_e), получить аналитические зависимости и построить численные схемы для проведения таких вычислений.

2. ТЕМПЕРАТУРНЫЕ ЭФФЕКТЫ В МОДЕЛИ ТЕРМИЧЕСКОГО ПИКА

При рассмотрении прохождения тяжелых заряженных ионов высоких энергий (ТЗИВЭ)

принято считать, что часть энергии частицы (как правило, менее нескольких процентов) расходуется на упругие взаимодействия $S_{el}(z)$, приводя к образованию первичных точечных дефектов: вакантных узлов в решетке (вакансий) и междоузельных атомов, и на ионизацию-разогрев электронов решетки. Первая часть потерь энергии ТЗИВЭ относительно мала (несколько процентов от полных потерь энергии). В результате возбужденные электроны с энергией, превышающей энергию Ферми (E_F), передают свою энергию холодным “электронам” за счет кулоновского рассеяния. Характерное время этого процесса (τ_{th}) примерно на порядок меньше времени охлаждения электронов вследствие электронной

теплопроводности, т.е. $\tau_{th} \ll \tau_\chi = \frac{r_0^2}{\chi_e}$, где χ_e –

теплопроводность электронного газа [17]. Следовательно, процесс остывания “горячих” электронов можно описать уравнением теплопроводности. Рассеяние “горячих” электронов на атомах в узлах решетки приводит к повышению решеточной температуры. Характерное время теплопередачи от электронов решетке удовлетворяет условию $\tau_L \gg \tau_\chi$. Отклонения от данного условия и их влияние на радиационные эффекты будут обсуждены ниже.

Задачу определения температурных эффектов можно разделить: вначале рассмотреть охлаждение электронов вследствие электронной теплопроводности, а затем полученный пространственно-временной профиль температуры $T_e(r,z,t)$ электронов использовать для вычисления температуры решетки $T(r,z,t)$. Именно такая последовательность в вычислениях и была проведена в расчетах температур применительно к

кристаллическим и аморфным структурам в работе [17].

С учетом аксиальной симметрии неупругих потерь энергии тяжелого иона высокой энергии

$S_{inel} = -\left(\frac{\partial E}{\partial z}\right)_{inel}(z)$ система уравнений для

$$C_e(T_e) \cdot \frac{\partial T_e}{\partial t} = \frac{1}{r} \cdot \frac{\partial \left(r \chi_e(T_e) \cdot \frac{\partial T_e}{\partial r} \right)}{\partial r} + \frac{\partial \left(\chi_e(T_e) \cdot \frac{\partial T_e}{\partial z} \right)}{\partial z} - g(T_e - T) + A(r, z, t), \quad (2.1)$$

$$C(T) \cdot \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{1}{r} \cdot \frac{\partial \left[r \cdot \chi^{\parallel}(T) \cdot \frac{\partial T}{\partial r} \right]}{\partial r} + \frac{\partial \left[\chi^{\perp}(T) \cdot \frac{\partial T}{\partial z} \right]}{\partial z} + g(T_e - T). \quad (2.2)$$

Здесь ось z направлена перпендикулярно плоскости мишени, т.е. по направлению движения тяжелого иона, производная по углу отсутствует ввиду цилиндрической симметрии; $T_e(r, z, t)$ и $T(r, z, t)$ – температуры электронов и решетки; $C_e(T_e)$, $C(T)$ и $\chi_e(T_e)$, $\chi^{\parallel}(T)$ и $\chi^{\perp}(T)$ – соответственно удельные теплоемкости и теплопроводности электронов и решетки, в общем случае зависящие от температуры; символы “ \parallel ” и “ \perp ” означают, что теплопроводность в решеточной подсистеме зависит от кристаллографических направлений: вдоль облучаемой поверхности (\parallel) и перпендикулярно к ней (\perp); g – константа электрон-фононного взаимодействия. В общем случае функция $A(r, z, t)$ – объемная плотность вносимой ионом мощности и может быть представлена в виде наиболее часто используемого выражения [23]:

$$A(r, z, t) = b \cdot S_{inel0} \cdot \exp\left[\frac{-(t-t_0)^2}{2\sigma_t^2}\right] \cdot \exp\left(-\frac{r}{r_0}\right) \cdot \mu(z).$$

Здесь функция $\mu(z)$ – нормированный на значение ионизационных потерь энергии на входе в мишень при $z=0$ профиль ионизационных потерь иона в виде функции Бете–Блоха (при $\frac{E}{A} > 0.25$ МэВ/а.е.м.) или функции

Линдхарда–Фирсова (при $\frac{E}{A} \leq 0.25$ МэВ/а.е.м.):

$$\mu(z) \equiv \frac{S_{inel}(z)}{S_{inel0}}, \quad S_{inel0} \equiv S_{inel}(z=0),$$

где E (МэВ) – энергия иона, а A (а.е.м.) – его масса. Время достижения электронами равновесного распределения (т.е. время свободного пробега δ -электронов со средней энергией ε_e), $t_0 \approx (1-5) \times 10^{-15}$ с, полуширина распределения по t принята равной $\sigma_t = t_0$ [24]. Скорость экспоненциального спада [25] или пространственная ширина высоковозбужденной области [26] $r_0 \leq 2.5$ нм (согласно данным работы [25]) и $r_0 \approx 1$ нм (см. [17]). Нормировочный множитель b определяется из условий нормировки:

определения решеточной и электронной температур в цилиндрической системе координат может быть записана в виде, полученном в основополагающих работах [18–21] и использованном в расчетах в более поздних работах (см., например, [4–5, 11–12, 22]):

$$\int_0^{\infty} dt \cdot \int_0^{r_m} 2\pi r \cdot A(r, z, t) \cdot dr = S_{inel} \equiv -\left(\frac{\partial E}{\partial z}\right)_{inel}(z).$$

Здесь r_m – максимальный пробег δ -электронов, зависящий от максимальной энергии ε_m , передаваемой отдельному электрону [17, 26].

Из условия ограниченности решений уравнений (температур электронов и решетки) и их равенства исходной температуре на достаточно удаленном расстоянии от траектории по радиусу (R_{max}) и по глубине (Z_{max}) можем написать начальные условия (см., например, [4–6]):

$$T(r, z, t=0) = T_0 \text{ и } T_e(r, z, t=0) = T_0,$$

а граничные условия запишем как

$$\frac{\partial T_e(r, z, t)}{\partial r} \Big|_{r \rightarrow r_{min}} = 0 \text{ и } \frac{\partial T_e(r, z, t)}{\partial t} \Big|_{r \rightarrow r_{min}} = 0,$$

$$T(r=R_{max}, z, t) = T_0 \text{ и } T_e(r=R_{max}, z, t) = T_0,$$

$$T(r, z=Z_{max}, t) = T_0 \text{ и } T_e(r, z=Z_{max}, t) = T_0.$$

Здесь и далее R_{max} – минимальный радиус удаления от траектории иона, а Z_{max} – минимальная глубина, превышающая длину проективного пробега иона, при превышении которых решетку можно считать невозмущенной, а ее температуру при $r > R_{max}$ и $z > Z_{max}$ равной T_0 .

Рассмотрим переход температуры решетки через точку плавления – переход из твердой фазы в жидкую (или обратный переход). На поверхности фазового перехода все время сохраняется постоянная температура. При движении поверхности фазового перехода происходит поглощение (выделение) скрытой теплоты плавления (затвердевания). Задача о распространении тепла при наличии фазового перехода, например, проблема расплавления твердого тела, характеризуется следующими условиями. Пусть границей раздела двух фаз является цилиндрическая область с радиусом $r = R_{S-M}(t)$, т.е. при $0 \leq r \leq R_{S-M}(t)$ образуется расплавленная область, а при $R_{S-M}(t) < r < R_{max}$ –

твердая фаза. Тогда для температуры решетки в обеих областях имеем:

$$C_M(T_1) \cdot \frac{\partial T_1}{\partial t} = \frac{1}{r} \cdot \frac{\partial \left[r \chi_M(T_1) \cdot \frac{\partial T_1}{\partial r} \right]}{\partial r} + \frac{\partial \left[\chi_M(T_1) \cdot \frac{\partial T_1}{\partial z} \right]}{\partial z} + g(T_e - T_1)$$

при $0 \leq r < R_{M-S}(t)$;

$$C_S(T_2) \cdot \frac{\partial T_2}{\partial t} = \frac{1}{r} \cdot \frac{\partial \left[r \chi_S^{\parallel}(T_2) \cdot \frac{\partial T_2}{\partial r} \right]}{\partial r} + \frac{\partial \left[\chi_S^{\perp}(T_2) \cdot \frac{\partial T_2}{\partial z} \right]}{\partial z} + g(T_e - T_2)$$

при $R_{M-S}(t) \leq r < R_{max}$.

Начальное и граничное условия на функцию $T(r, z, t)$ имеют вид:

$$T_2(r, z, t=0) = T_0, \quad T_2(r=R_{max}, z, t) = T_0, \quad T_2(r, z=Z_{max}, t) = T_0,$$

а условия на цилиндрической границе плавления между твердой (S) и жидкой (M) фазами, $r=R_{S-M}(t)$, и на торцевой части перегретой области с границей между твердой и жидкой фазами, $z=Z_{S-M}(t)$, выражаются как

$$T_1(r=R_{S-M}-0, z, t) = T_2(r=R_{S-M}+0, z, t) = T_{melt}(P), \quad (2.3)$$

$$\chi_S^{\parallel}(T_2) \cdot \frac{\partial T_2(r=R_{S-M}+0, z, t)}{\partial r} - \chi_M(T_1) \cdot \frac{\partial T_1(r=R_{S-M}-0, z, t)}{\partial r} = \lambda_{S-M} \rho_S \cdot \frac{\partial R_{S-M}}{\partial t}, \quad (2.4)$$

$$T_1(r, z=Z_{S-M}-0, t) = T_2(r, z=Z_{S-M}+0, t) = T_{melt}(P), \quad (2.5)$$

$$\chi_S^{\perp}(T_2) \cdot \frac{\partial T_2(r, z=Z_{S-M}+0, t)}{\partial z} - \chi_M(T_1) \cdot \frac{\partial T_1(r, z=Z_{S-M}-0, t)}{\partial z} = \lambda_{S-M} \rho_S \cdot \frac{\partial Z_{S-M}}{\partial t}, \quad (2.6)$$

где ρ_S – плотность твердой фазы. Аналогично можно записать уравнения для границы жидкость (M) – вакуум-пар (V); это условие будет иметь вид на стенках цилиндра с радиусом $r=R_{M-V}(t)$ и на торцевой части трека при $z=Z_{M-V}(t)$:

$$T_1(r=R_{M-V}+0, z, t) = T_1(r, z=Z_{M-V}+0, t) = T_{boil}(P), \quad (2.7)$$

$$-\chi_M(T_1) \cdot \frac{\partial T_1(r=R_{M-V}+0, z, t)}{\partial r} = \lambda_{M-V} \rho_M \cdot \frac{\partial R_{M-V}}{\partial t}, \quad (2.8)$$

$$-\chi_M(T_1) \cdot \frac{\partial T_1(r, z=Z_{M-V}+0, t)}{\partial z} = \lambda_{M-V} \rho_M \cdot \frac{\partial Z_{M-V}}{\partial t}, \quad (2.9)$$

т.е. считаем, что имеется подвижная граница в форме полого конуса с координатами $r=R_{M-V}(t)$ и $z=Z_{M-V}(t)$, со стенок которого может происходить испарение атомов решетки. При $R_{M-V}(t) \leq r < R_{S-M}$ и $Z_{M-V}(t) < z < Z_{S-M}$ – имеем жидкую фазу (M); при $R_{S-M} < r < R_{max}$ и $Z_{S-M} < z < Z_{max}$ будет твердая фаза. Здесь и далее T_{melt} и T_{boil} – температуры плавления и кипения-испарения материала, а ρ_M – плотность жидкой фазы. Фактически граничные условия (2.7)–(2.9) означают, что процесс испарения материала (атомов решетки) происходит со стенок диска с высотой Z_{M-V} и радиусом R_{M-V} . Здесь λ_{S-M} – удельная

(скрытая) теплота плавления; ρ – плотность материала решетки; $\chi^{\parallel, \perp}_S(T)$ и $\chi_M(T)$ – удельные теплопроводности твердой фазы (в зависимости от кристаллографических направлений в решетке) и жидкой фазы соответственно, а λ_{M-V} – удельная теплота парообразования.

Число атомов решетки, испаряющихся из перегретой зоны, подвижные границы стенок которой имеют координаты $r=R_{M-V}(t)$ и $Z=Z_{M-V}(t)$, в единицу времени с единицы площади задается соотношениями:

$$\frac{\partial n_r(r=R_{M-V}-0, z, t)}{\partial t} = \frac{\rho_M}{M_i} \cdot \frac{\partial R_{M-V}}{\partial t} \approx \frac{1}{2\pi R_{M-V} Z_{M-V} M_i} \cdot \frac{\partial M_r}{\partial t},$$

$$\frac{\partial n_z(r, z=Z_{M-V}, t)}{\partial t} = \frac{\rho_M}{M_i} \cdot \frac{\partial Z_{M-V}}{\partial t} \approx \frac{1}{\pi R_{M-V}^2 M_i} \cdot \frac{\partial M_z}{\partial t},$$

где $\frac{\partial M_r}{\partial t}$ и $\frac{\partial M_z}{\partial t}$ – масса атомов решетки, испаренная

с боковой поверхности цилиндра радиусом $r=R_{M-V}(t)$ и глубиной $Z_{M-V}(t)$ и со дна цилиндра при $Z=Z_{M-V}(t)$ в единицу времени; M_i – масса атома решетки; ρ_M – плотность материала в жидкой фазе.

Выражение для скорости испарения атомов с поверхности при бомбардировке материалов ионами с высокими ионизационными потерями энергии представлено в [37]:

$$\frac{dn(r, t)}{dt} = N \left[\frac{k_B T(r, t)}{2\pi M_i} \right]^{\frac{1}{2}} \cdot \exp\left(-\frac{U_0}{k_B T(r, t)}\right).$$

Здесь N – плотность атомов в жидкой фазе; U_0 – энергия связи атомов на поверхности жидкости, которая может быть оценена как ~ 1 эВ [27, 28]. Тогда должно выполняться условие:

$$Z_{M-V}(t) = \int_0^t \left[\frac{k_B T(r, t^*)}{2\pi M_i} \right]^{\frac{1}{2}} \cdot \exp\left(-\frac{U_0}{k_B T(r, t^*)}\right) \cdot dt^*.$$

При использовании системы связанных уравнений (2.1), (2.2) следует учитывать следующее положение. При торможении быстрой тяжелой заряженной частицы в конденсированных средах такая частица теряет свою энергию на возбуждение и ионизацию атомов. Удельные неупругие потери энергии ускоренного иона $\left(S_{inel} = -\left(\frac{\partial E}{\partial z} \right)_{inel} \right)$

составляют десятки кэВ/нм, а плотности возбужденных электронов в цилиндрической области с диаметром 100 Å могут быть порядка 10^{20} см⁻³ и выше. Процессы релаксации энергии возбужденных электронов следующие: электрон-электронное рассеяние (время релаксации порядка $10^{-15} \dots 10^{-13}$ с), электрон-решеточная релаксация (время релаксации порядка $10^{-13} \dots 10^{-12}$ с), фонон-фононное рассеяние (время релаксации порядка 10^{-12} с). Введение термодинамического понятия температуры решетки и описание процессов перераспределения температуры с помощью уравнения теплопроводности с равновесными

значениями термодинамических параметров возможно в случае, когда атомы решетки образуют статистически-равновесный ансамбль, т.е. при временах порядка 10^{-12} с.

Для времен, меньших 10^{-12} с, возможно, следует использовать иную температурную модель, учитывающую волновой характер переноса тепловой энергии (см., например, [29–31]). В данной работе будем считать, как и в [4], что вычисленная температура решетки при временах $t < 10^{-12}$ с понимается как энергия, перешедшая к атомам решетки.

Если время t порядка $t_0 \approx (1...5) \times 10^{-15}$ с, когда функцию источника $A(r, z, t)$ в уравнении (2.1) еще нужно учитывать, следует отметить следующее:

а) при $t \sim t_0$ температура решетки $T(r, z, t)$ не может измениться сколько-нибудь существенно;

б) за время существования функции источника $A(r, z, t)$ можно рассчитывать профиль распределения электронной температуры без учета решеточной температуры;

в) при временах $t > t_0$ функцией источника можно пренебречь;

г) так как для функций $T_e(r, z, t)$ и $T(r, z, t)$ координаты r и z изменяются на существенно различных масштабах длин (область изменения радиуса от оси трека составляет несколько десятков нанометров, а область изменения по глубине – до нескольких десятков микрометров (до глубин порядка проективного пробега иона)), то функции $T_e(r, z, t)$ и $T(r, z, t)$ по координате z будут изменяться значительно меньше, чем по координате r для того же времени t . Это означает, что временные зависимости изменений температур по r и z имеют как бы различные “постоянные времени”. Поэтому шаги численного дифференцирования уравнений (2.1) и (2.2) по координатам r и z могут быть существенно различными.

Параметры, входящие в систему уравнений (2.1), (2.2) приведены в работах [4, 5, 32].

В заключение данного раздела приведем выражения для теплопроводностей жидкостей. Как показано в обзоре [33], теплопроводность жидких металлов обусловлена главным образом электронной теплопроводностью. Поэтому коэффициент теплопроводности можно вычислять при помощи закона Видемана–Франца, если известен коэффициент электропроводности. Точность значений, полученных таким образом, составляет примерно 15% вблизи точки плавления и возрастает с повышением температуры, так как с ростом температуры число Лоренца жидких металлов приближается к теоретическому значению $L = \chi / (\sigma T) = 2.44$ Вт·Ом/К². В предположении, что функция Лоренца одинакова для жидкой (M) и твердой (S) фаз, можно написать, что отношение теплопроводностей в твердой и жидкой фазах выражается экспоненциальной функцией с показателем в виде отношения скрытой теплоты плавления L (в кДж/г-моль) к температуре плавления T_{melt} (К):

$$\frac{\chi_S}{\chi_M} = \left(\frac{v_S}{v_M} \right)^2 = \exp \left(\frac{80 L}{T_{melt}} \right).$$

Здесь v_S и v_L – частоты колебаний атомов в твердой и жидкой фазах соответственно.

2.1. ЗАВИСИМОСТЬ ПАРАМЕТРОВ МОДЕЛИ ОТ ДАВЛЕНИЯ

Как известно [34, 35], уравнение состояния твердого тела записывается в виде уравнения Ми–Грюнайзена:

$$P \cdot V = P_0 \cdot V + 2 \cdot \gamma E,$$

где $\gamma = \frac{\alpha(T)V}{k_T C_V}$ – постоянная Грюнайзена; $\alpha(T)$ – температурный коэффициент

объемного расширения; $k_T = -\frac{1}{V} \cdot \left(\frac{dV}{dP} \right)_T = \frac{\alpha V}{\gamma C_V}$ –

изотермическая сжимаемость; P_0 – давление при $T=0$ К; E – тепловая энергия кристаллической решетки: $E \approx \frac{3}{2} RT$; R – газовая постоянная.

Выражение для P_0 имеет вид:

$$P_0 = A \cdot r^{-2} \cdot \exp[b(1-r)] - K \cdot r^{-m},$$

где $r = \left(\frac{V}{V_0} \right)^{\frac{1}{3}}$; A, b, K – постоянные; параметр $m=4$

для молекулярных кристаллов и $m=9$ для ионных, щелочных и других металлов с сильным перекрытием электронных оболочек.

Учитывая, что $C_V = 3Rn \cdot D\left(\frac{T_D}{T}\right)$, n – число

атомов в молекуле, а $D\left(\frac{T_D}{T}\right)$ – функция Дебая,

причем $D\left(\frac{T_D}{T}\right) \approx 1$ при $T > T_D$ (T_D – температура

Дебая), находим (см. также работы [36, 37]), что выражение, связывающее изменение температуры $\Delta T = T - T_0$, где T_0 – начальная температура решетки, и изменение давления $\Delta P = P - P_0$ в области трека при постоянном объеме ($V = V_0$), имеет вид:

$$\Delta P \cong \alpha(T) \cdot \frac{\Delta T}{k_T}.$$

Заметим, что температуры плавления T_{melt} , кипения T_{boil} и сублимации T_{subl} также зависят от давления, а именно с ростом давления значения T_{boil} и T_{subl} возрастают, а T_{melt} , как правило, тоже возрастает [34, 35]. Процессы плавления, кипения и сублимации зависят от давления в соответствии с уравнением Клапейрона–Клаузиуса:

$$\frac{dT}{dP} = T \cdot \frac{\Delta V}{\Delta H},$$

где $T, \Delta H$ – температура и теплота перехода; ΔV – изменение объема вещества при переходе. Зависимости $T_{boil}(P)$ и $T_{subl}(P)$ называются кривой упругости пара ([34], гл.11). Тогда имеем:

$$T_{melt}(P) = 273 + \Delta P \cdot \frac{dT_{melt}}{dP}.$$

Например, значение температуры плавления для никеля $T_{melt}(P=10^5 \text{ Па}) = 1728 \text{ К}$ и $T_{melt}(P=5 \cdot 10^9 \text{ Па}) = 1913 \text{ К}$.

Значения температуры $T_{boil}(P)$ и $T_{sub}(P)$, при которой достигается давление насыщенного пара P для неорганических соединений, можно найти в [34], как полученные из соотношения

$$T_{boil}(P) = \frac{A}{B-P}, \text{ где } A \text{ и } B \text{ – постоянные.}$$

3. ЧИСЛЕННЫЕ СХЕМЫ ВЫЧИСЛЕНИЙ. АЛГОРИТМЫ

При численном решении уравнений (2.1) и (2.2) целесообразно ввести безразмерные переменные, а именно:

$$\begin{aligned} T_\alpha &\equiv \frac{T_\alpha}{T_0}, r' \equiv \frac{r}{\Delta r}, z' \equiv \frac{z}{\Delta z}, t' \equiv \frac{t}{\Delta t}, C_\alpha' \equiv \frac{C_\alpha}{C_\alpha^0}, \\ \chi_\alpha &\equiv \frac{\chi_\alpha \cdot \Delta t}{C_\alpha^0 \cdot \Delta r^2}, g_\alpha' \equiv \frac{g \cdot \Delta t}{C_\alpha^0}, A'(r', z', t) \equiv \frac{A \cdot \Delta t}{C_e^0 T_0}, \\ R_{\max} &\equiv \frac{R_{\max}}{\Delta r}, Z_{\max}' \equiv \frac{Z_{\max}}{\Delta z}, \end{aligned}$$

где $\alpha=i$ или e . Тогда численная система уравнений (2.1) и (2.2) в безразмерных переменных имеет вид:

$$\begin{aligned} C(T_{I,J,K}) \cdot \frac{T_{I,J,K+1} - T_{I,J,K}}{\tau} &= \frac{\sigma}{r_I h^*_{I+1}} \left[B_{I+\frac{1}{2},J,K+1} \cdot \frac{T_{I+1,J,K+1} - T_{I,J,K+1}}{h_{I+1}} - B_{I-\frac{1}{2},J,K+1} \cdot \frac{T_{I,J,K+1} - T_{I-1,J,K+1}}{h_I} \right] \\ &+ \frac{1-\sigma}{r_I h^*_{I+1}} \left[B_{I+\frac{1}{2},J,K} \cdot \frac{T_{I+1,J,K} - T_{I,J,K}}{h_{I+1}} - B_{I-\frac{1}{2},J,K} \cdot \frac{T_{I,J,K} - T_{I-1,J,K}}{h_I} \right] + \\ &+ \frac{\sigma}{h^*_{J+1}} \left[F_{I,J+\frac{1}{2},K+1} \cdot \frac{T_{I,J+1,K+1} - T_{I,J,K+1}}{h_{J+1}} - F_{I,J-\frac{1}{2},K+1} \cdot \frac{T_{I,J,K+1} - T_{I,J-1,K+1}}{h_J} \right] + \\ &+ \frac{1-\sigma}{h^*_{J+1}} \left[F_{I,J+\frac{1}{2},K} \cdot \frac{T_{I,J+1,K} - T_{I,J,K}}{h_{J+1}} - F_{I,J-\frac{1}{2},K} \cdot \frac{T_{I,J,K} - T_{I,J-1,K}}{h_J} \right] + g(T_{I,J,K}^e) \cdot (T_{I,J,K}^e - T_{I,J,K}) \quad (3.4) \\ C^e(T_{I,J,K}) \cdot \frac{T_{I,J,K+1}^e - T_{I,J,K}^e}{\tau} &= \\ &\frac{\sigma}{r_I h^*_{I+1}} \left[B_{I+\frac{1}{2},J,K+1}^e \cdot \frac{T_{I+1,J,K+1}^e - T_{I,J,K+1}^e}{h_{I+1}} - B_{I-\frac{1}{2},J,K+1}^e \cdot \frac{T_{I,J,K+1}^e - T_{I-1,J,K+1}^e}{h_I} \right] + \\ &+ \frac{1-\sigma}{r_I h^*_{I+1}} \left[B_{I+\frac{1}{2},J,K}^e \cdot \frac{T_{I+1,J,K}^e - T_{I,J,K}^e}{h_{I+1}} - B_{I-\frac{1}{2},J,K}^e \cdot \frac{T_{I,J,K}^e - T_{I-1,J,K}^e}{h_I} \right] + \\ &+ \frac{\sigma}{h^*_{J+1}} \left[F_{I,J+\frac{1}{2},K}^e \cdot \frac{T_{I,J+1,K}^e - T_{I,J,K}^e}{h_{J+1}} - F_{I,J-\frac{1}{2},K}^e \cdot \frac{T_{I,J,K}^e - T_{I,J-1,K}^e}{h_J} \right] + \\ &+ \frac{1-\sigma}{h^*_{J+1}} \left[F_{I,J+\frac{1}{2},K}^e \cdot \frac{T_{I,J+1,K}^e - T_{I,J,K}^e}{h_{J+1}} - F_{I,J-\frac{1}{2},K}^e \cdot \frac{T_{I,J,K}^e - T_{I,J-1,K}^e}{h_J} \right] - g(T_{I,J,K}^e) \cdot (T_{I,J,K}^e - T_{I,J,K}) + A_{I,J,K}. \quad (3.5) \end{aligned}$$

В выражениях (3.4) и (3.5) введены обозначения:

$$C_i' \cdot \frac{\partial T_i'}{\partial t'} = \frac{1}{r'} \cdot \frac{\partial \left(r' \chi_i' \cdot \frac{\partial T_i'}{\partial r'} \right)}{\partial r'} + \frac{\partial \left(\chi_i' \cdot \frac{\partial T_i'}{\partial z'} \right)}{\partial z'} + g_i'(T_e' - T_i'), \quad (3.1)$$

$$C_e' \cdot \frac{\partial T_e'}{\partial t'} = \frac{1}{r'} \cdot \frac{\partial \left(r' \chi_e' \cdot \frac{\partial T_e'}{\partial r'} \right)}{\partial r'} + \frac{\partial \left(\chi_e' \cdot \frac{\partial T_e'}{\partial z'} \right)}{\partial z'} + g_e'(T_i' - T_e') + A(r', z', t'). \quad (3.2)$$

Ниже индекс «'» без потери ясности написания будет опущен.

Численное решение уравнений (2.1) и (2.2) в трехмерном случае в цилиндрических координатах будем искать, используя методы, описанные в [38–40]. Рассмотрим прямоугольную сетку по r и z с переменными шагами h_I и h_J :

$$r \in [r_{\min}, R_{\max}], h_I = r_I - r_{I-1}, I=0, 1, \dots, N1,$$

где $r_0 = r_{\min}, r_{N1} = R_{\max}$;

$$z \in [0, Z_{\max}], h_J = z_J - z_{J-1}, J=0, 1, \dots, N2,$$

где $z_0 = 0, z_{N2} = Z_{\max}$;

$$h_J^* = 0.5 \cdot [h_{J+1} + h_J]. \quad (3.3)$$

Введем на отрезке $0 \leq t \leq T$ сетку по времени $t_K = \tau \cdot K$ с постоянным шагом τ . Здесь $K=0, 1, \dots, K_{\max} = \frac{T}{\tau}$.

Решение дифференциально-разностной задачи для определения $T_e(r, z, t)$ и $T(r, z, t)$ запишем в схеме с весами и с переменными шагами:

$$B_{I+\frac{1}{2},J,K}^e \equiv 0.25 \cdot (r_{I+1} + r_I) \cdot [\chi^e(T_{I+1,J,K}) + \chi^e(T_{I,J,K})],$$

$$F_{I,J+\frac{1}{2},K}^e \equiv 0.5 \cdot [\chi^e(T_{I,J+1,K}) + \chi^e(T_{I,J,K})],$$

$$B_{I+\frac{1}{2},J,K} \equiv 0.25 \cdot (r_{I+1} + r_I) \cdot [\chi^{\parallel}(T_{I+1,J,K}) + \chi^{\parallel}(T_{I,J,K})],$$

$$F_{I,J+\frac{1}{2},K} \equiv 0.5 \cdot [\chi^{\perp}(T_{I,J+1,K}) + \chi^{\perp}(T_{I,J,K})],$$

$$T_{I,J,K}^e \equiv T^e(r_I, z_J, t_K) \text{ и } T_{I,J,K} \equiv T(r_I, z_J, t_K). \quad (3.6)$$

Для сокращения времени вычисления при численном решении уравнений (3.1) и (3.2) можно использовать иной набор коэффициентов в (3.4)–(3.6) с заменой $B_{I+\frac{1}{2},J,K}$ и $F_{I,J+\frac{1}{2},K}$ на $B_{I\pm 1,K}$ и

$$F_{J\pm 1,K}:$$

$$B_{I\pm 1,K}^e \equiv r_{I\pm 1} \cdot \chi^e(T_{I\pm 1,J,K}), F_{I,J\pm 1,K}^e \equiv \chi^e(T_{I,J\pm 1,K}),$$

$$B_{I\pm 1,K} \equiv r_{I\pm 1} \cdot \chi^{\parallel}(T_{I\pm 1,J,K}), F_{I,J\pm 1,K} \equiv \chi^{\perp}(T_{I,J\pm 1,K}),$$

$$h_I^* \equiv h_I. \quad (3.7)$$

Ясно, что для случая, обычно решаемого, с зависимостью в системе уравнений (3.1) и (3.2) только от r следует положить $F_{I,J\pm 1,K}$ и $F_{I,J\pm 1,K}^e$ в выражениях (3.4)–(3.6) и $F_{I,J,K}$ и $F_{I,J,K}^e$ в выражении (3.7) равными нулю.

Заметим, что приведенная в выражениях (3.4) и (3.5) схема устойчива при условии (для сетки с постоянными шагами h_1 и h_2 по координатам r и z):

$$\sigma \geq \sigma_0, \quad \sigma_0 = 0.5 - \frac{1}{\tau \left(\frac{4}{h_1^2} + \frac{4}{h_2^2} \right)}.$$

Следовательно, на квадратной сетке $h_1 = h_2 = h$ условие устойчивости будет иметь вид $\tau < \frac{h^2}{4}$ (в одномерном случае при отсутствии производной по z условие устойчивости будет $\tau < \frac{h^2}{2}$). Поэтому

схемы с $\sigma \geq \frac{1}{2}$, в том числе и неявная ($\sigma = 1$) и симметричная ($\sigma = \frac{1}{2}$), безусловно устойчивы, а скорости сходимости при безусловной устойчивости будут $O(\tau + h^2)$ при $\sigma \geq \frac{1}{2}$ и $O(\tau^2 + h^2)$ при $\sigma = \frac{1}{2}$ [40].

Начальные условия в разностной форме представим в виде:

$T_{I,J,K=0} = T_0$, $T_{I,J,K=0}^e = T_0$ при $I=0,1,\dots,N1$ и $J=0,1,\dots,N2$, а граничные условия в разностной форме можно записать как

$$\frac{T_{I=1,J,K} - T_{I=0,J,K}}{r_1} = 0, \quad \frac{T_{I=1,J,K}^e - T_{I=0,J,K}^e}{r_1} = 0,$$

$T_{I,N1,J,K} = T_0$, $T_{I,N1,J,K}^e = T_0$ при $K=0,1,\dots,K_{\max}$ и $J=0,1,\dots,N2$, $T_{I,N2,K} = T_0$, $T_{I,N2,K}^e = T_0$ при $K=0,1,\dots,K_{\max}$ и $I=0,1,\dots,N1$.

Условия (2.3)–(2.9) на границе жидкость (M) – твердая фаза (S) и на границе жидкость (M) – вакуум (V) также записываются в прямоугольной сетке (3.1).

60

При решении уравнений (3.2) и (3.3) можно использовать экономичную схему, так называемую схему переменных направлений (см., например, [39, 40]). В частности, при написании вычислительного алгоритма можно использовать попеременно-треугольный метод или продольно-поперечную схему Писмена–Рекфорда [39, 40]. При этом при переходе от слоя K (с координатой по времени t_K) на слой $(K+1)$ (с координатой по времени t_{K+1}) надо решать методом прогонки трехточечные разностные уравнения для $T_{I-1,J,K}$, $T_{I,J,K}$, $T_{I+1,J,K}$ вначале вдоль строк (по $I=0,1,2,\dots,N1$), а затем для $T_{I,J-1,K}$, $T_{I,J,K}$, $T_{I,J+1,K}$ вдоль столбцов ($J=0,1,2,\dots,N2$) на разностной сетке [39, 40].

4. ПРИБЛИЖЕННЫЕ ОЦЕНКИ ТЕМПЕРАТУРЫ В ТРЕКЕ ИОНА

Как показано в работе [22], приближенный радиус трека тяжелого иона и, следовательно, перегретой области, можно представить в виде:

$$r_{tr} = \left[\left(\frac{S_{inel0}}{\pi\eta} \right)^{\frac{1}{2}} \cdot \frac{\eta \xi_e}{\alpha} \right]^{\frac{1}{3}}, \quad (4.1)$$

где $\eta = \frac{C_e}{T_e}$, а $\xi_e = \frac{\chi_e}{C_e}$ – температуропроводность электронного газа. Выражение (4.1) получено в предположении, что $T_e \gg T$. Тогда выражение для температуры на расстоянии r от оси трека записывается как [22]

$$T(r) = \frac{\Psi S_{inel0}}{\pi r^2 C_V} \cdot \exp\left(-\frac{r^2}{r_{tr}^2}\right). \quad (4.2)$$

Здесь Ψ – коэффициент, учитывающий долю ΔE_L потерь энергии E тяжелой быстрой заряженной частицы, пошедшей на нагревание области со среднеквадратичным радиусом r_{tr} , т. е. $\Psi = \frac{\Delta E_L}{E}$.

При получении выражений (4.1), (4.2) и ниже считается, что константы $C_e(T_e)$, $C(T)$ и $\chi_e(T_e)$, $\chi(T)$, входящие в уравнения (2.1) и (2.2), не зависят от температуры. Однако при вычислениях используются их высокотемпературные значения.

Решение уравнения теплопроводности (2.2) для решеточной температуры без последнего члена в правой части имеет вид [41–43]:

$$T(r, t) = \frac{\Psi S_{inel0}}{4\pi\chi t} \cdot \exp\left(-\frac{r^2 C_V}{4\chi t}\right). \quad (4.3)$$

Полагая $r_r^2(t) \equiv \frac{4\chi t}{C_V}$, выражение (4.3) записываем

как:

$$T(r, t) = \frac{\Psi S_{inel0}}{\pi r_r^2 C_V} \cdot \exp\left(-\frac{r^2}{r_r^2}\right). \quad (4.4)$$

Видно, что выражения (4.2) и (4.4) по форме совпадают. При $r \neq 0$ максимум выражения (4.3) по времени достигается при $t_m = \frac{r^2 C_V}{4\chi}$ и имеет значение:

$$T_m(r, t) = \frac{\Psi S_{inel0} e^{-1}}{\pi r_{ir}^2 \cdot C_e}.$$

В работе [18] по температурным пикам выводится приближенное выражение для решеточной температуры ($T(r, t)$). При этом искалось решение уравнения (2.1) для $\Theta = T_e - T$. Тогда

$$C_e \cdot \frac{\partial \Theta}{\partial t} = \frac{1}{r} \cdot \frac{\partial \left(r \chi_e \frac{\partial \Theta}{\partial r} \right)}{\partial r} + \frac{\partial \left(\chi_e \frac{\partial \Theta}{\partial z} \right)}{\partial z} - g \cdot \Theta.$$

$$C(T) \cdot \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{1}{r} \cdot \frac{\partial \left(r \chi(T) \cdot \frac{\partial T}{\partial r} \right)}{\partial r} + \frac{\partial \left(\chi(T) \cdot \frac{\partial T}{\partial z} \right)}{\partial z} + \frac{g S_{inel0}}{\pi r_{etr}^2 C_e} \cdot \exp \left(-\frac{r^2}{r_{etr}^2} - \frac{gt}{C_e} \right). \quad (4.5)$$

Выражение $r_{etr}^2 = \frac{r^2 C_e}{4 \chi_e t}$ – квадрат

среднеквадратичного радиуса распределения электронной температуры. Решение уравнения (4.5) может быть записано в виде [18]

$$T = \frac{g S_{inel0}}{4 \pi C_e C} \cdot \int_0^t \frac{\exp \left[-\frac{r^2}{4[\xi(t-t') + \xi_e t']} - \frac{gt'}{C_e} \right] \cdot dt'}{\xi(t-t') + \xi_e t'} \quad (4.6)$$

По теореме о среднем, заменим интеграл его значением при некотором t^* из интервала $t^* \in (0, t)$; тогда выражение (4.6) можно, вводя новые переменные

$$r_{ir}^2 \equiv \frac{4 \chi(t-t^*)}{C} \equiv 4 \xi(t-t^*) \quad \text{и} \quad r_{etr}^2 \equiv \frac{4 \chi_e t^*}{C_e} \equiv 4 \xi_e t^*,$$

записать в виде:

$$T(r, t) = \frac{g S_{inel0} t}{\pi C_e C} \cdot \frac{\exp \left(-\frac{r^2}{r_{ir}^2 + r_{etr}^2} \right)}{r_{ir}^2 + r_{etr}^2} \cdot \exp \left(-\frac{gt^*}{C_e} \right). \quad (4.7)$$

Здесь $\xi_e = \frac{\chi_e}{C_e}$ и $\xi = \frac{\chi}{C}$ – температуропроводности

электронного газа и решетки соответственно. Представим t^* в виде $t^* = \delta t$, где $0 < \delta < 1$. Продифференцировав (4.7) по t , найдем значение t_m , при котором функция $T(r, t)$ максимальна:

$$t_m = \frac{C_e}{g} \cdot \frac{r}{r_m}, \quad \text{где введено обозначение}$$

$$r_m \equiv \left\{ \frac{4 C_e [\xi(1-\delta) + \xi_e \delta]}{g} \right\}^{\frac{1}{2}}. \quad \text{При этом значение } T(r, t)$$

при $t = t_m$ имеет вид:

$$T(r, t_m) = \frac{S_{inel0}}{\pi C r_m^2} \cdot \exp \left(-\frac{2 \delta^2 r^2}{r_m^2} \right). \quad (4.8)$$

Из выражения (4.8) видно, что оно напоминает приближенные выражения (4.2) и (4.4). Зависимость времени достижения максимальной температуры от константы электрон-фононного взаимодействия g достаточно сильная, а именно $t_m \sim g^{-3/2}$.

Решение этого уравнения имеет вид:

$$T_e - T = \frac{S_{inel0}}{\pi r_{etr}^2 C_e} \cdot \exp \left(-\frac{r^2}{r_{etr}^2} - \frac{gt}{C_e} \right).$$

После подстановки найденного решения в (2.2) получаем уравнение [18]:

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Приведенные в разд. 3 и 4 выражения позволяют вычислить температуру в треке тяжелого иона как численно, так и с использованием приближенных выражений из разд. 4. Отметим, что в рассмотренном случае учтено влияние давления на изменение параметров решетки, а также предусмотрена возможность достижения в треке температуры, превышающей не только температуру плавления, но и температуру кипения-испарения. Как принято считать, “трек” – сильно дефектная область, возникающая в материале не только вследствие упругих потерь энергии, но и неупругих, приводящих к таким температурам в треке, которые вызывают процессы переплава области вблизи траектории иона, а также возможное испарение с поверхности отдельных атомов решетки или целых кластеров из нескольких атомов.

В работе [17] рассмотрены процессы разогрева решетки для двух предельных случаев: для идеальной решетки и для аморфного тела. При этом для величины сечения рассеяния электрона на атоме материала для аморфного твердого тела (случай отсутствия периодического потенциала решетки) взято “газовое сечение”, равное $\sigma_{AM} = 2 \cdot \pi r_B^2 = 1.757 \cdot 10^{-16} \text{ см}^2$, а $r_B = 0.529 \cdot 10^{-8} \text{ см}$ – боровский радиус. Для монокристалла (наличие периодического потенциала и рассеяние электронов только на тепловых колебаниях атомов решетки)

взято $\sigma_{cr} = \sigma_{AM} \cdot \frac{k_B T}{M V_S^2}$. Здесь M – масса атома

решетки, а V_S – скорость звука.

Таким образом, в [17] рассмотрены два предельных случая: монокристаллы (кристаллические структуры с идеальным порядком в решетке) с температурами в “треке” значительно ниже температур плавления, и аморфные материалы (структуры, не обладающие дальним порядком в решетке) с температурами в “треке”, значительно превышающими температуру плавления. А область от монокристаллических структур до аморфных остается вне рассмотрения.

Заметим, что рассмотрение температурных эффектов на временах $t < 10^{-12} \text{ с}$, когда атомы решетки еще не образуют статистически равновесного ансамбля, требует учета волнового

характера переноса энергии (см., например, [29, 31]), что и планируется в дальнейшем.

ЛИТЕРАТУРА

1. D. Lesueur. Amorphisation par irradiation aux fragments de fission d'un alliage Pd-Si // *Radiat. Eff.* 1975, v. 24, N 2, p. 101–110.
2. И.А. Баранов, Ю.В. Мартыненко, С.О. Цепелевич, Ю.Н. Явлинский. Неупругое распыление твердых тел // *УФН.* 1988, т. 156, № 3, с. 477–510.
3. И.А. Баранов, А.С. Кривохатский, В.В. Обнорский. Механизм распыления материалов тяжелыми многозарядными ионами – осколками деления // *ЖТФ.* 1981, т. 51, №12, с. 2457–2475.
4. Z.G. Wang, Ch. Dufour, E. Paumier, M. Toulemonde. The S_e sensitivity of metals under irradiation swift-heavy-ion irradiation: a transient thermal process // *J. Phys.: Condens. Matter.* 1994, v. 6, № 34, p. 6733–6750.
5. C. Dufour, A. Audouard, F. Beuneu, J. Dural, J.P. Hairie, M. Levalois, E. Paumier, M. Toulemonde. 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, №26, p. 4573–4584.
6. A. Audouard, E. Balanzat, J.C. Jousset, D. Lesueur, L. Thomé. Atomic displacements and atomic motion induced by electron excitation in heavy-ion-irradiated amorphous metallic alloys // *J. Phys.: Condens. Matter.* 1993, v. 5, N5, p. 995–1018.
7. M. Toulemonde. Nanometric phase transformation of oxide materials under GeV energy heavy ion irradiation // *Nucl. Instrum. and Meth. Phys. Res. B.* 1999, v. 156, N1–4, p. 1–11.
8. R. Neumann. Scanning probe microscopy of ion-irradiated materials // *Nucl. Instrum. and Meth. Phys. Res. B.* 1999, v. 151, №1–4, p. 1–11.
9. S. Furuno, H. Otsu, K. Hojou, K. Izui. Tracks of high energy heavy ions in solids // *Nucl. Instrum. and Meth. Phys. Res. B.* 1996, v. 107, N 1–4, p. 223–226.
10. S.A. Karamian, Yu.Ts. Oganessian, V.N. Bugrov. The effect of high-energy ions heavier than argon on a germanium single crystal and a new mechanism for autorecrystallisation // *Nucl. Instrum. and Meth. Phys. Res. B.* 1989, v. 43, N 2, p. 153–158.
11. А.Ю. Дидык. Радиационное воздействие тяжелых ионов на хромоникелевую сталь при высоких температурах // *Металлы.* 1995. №3, с. 128–135.
12. А.Ю. Дидык, V.S. Varichenko. Track structure in dielectric and semiconductor single crystals irradiated by heavy ions with high level of inelastic energy loss // *Radiat. Meas.* 1995, v.25, N1–4, p. 119–124.
13. R.L. Fleisher, P.B. Price, R.M. Walker. Ion explosion spike mechanism for formation of charged-particle tracks in solids // *J. Appl. Phys.* 1965, v. 36, N11, p. 3645–3652.
14. R.L. Fleisher, P.B. Price, R.M. Walker. *Nuclear Track in Solids.* Los Angeles: Univ. of California, 1975.
15. I. Baranov, P. Hakanson, S. Kirillov, J.K. opniczky, A. Novikov, V. Obnorski, A. Pchelintsev, A.P. Quist, G. Torzo, S. Yarmiychuk, L. Zennaro. Desorption of nanoclusters (2–40 nm) from nanodispersed metal and semiconductor layers by swift heavy ions // *Nucl. Instrum. and Meth. Phys. Res. B.* 2002, v. 193, p. 798–803.
16. I. Baranov, A. Brunelle, S. Della-Negra, D. Jacquet, S. Kirillov, Y. Le Beyec, A. Novikov, V. Obnorski, A. Pchelintsev, K. Wien, S. Yarmiychuk. Sputtering of nanodispersed targets of gold and desorption of gold nanoclusters (2...100 nm) 6 MeV Au₅ cluster ions // *Nucl. Instrum. and Meth. Phys. Res. B.* 2002, v. 193, p. 809–815.
17. Yu. Yavlinskii. Track formation in amorphous metals under swift heavy ion bombardment // *Nucl. Instrum. and Meth. Phys. Res. B.* 1998, v.146, N 1–4, p. 142–146.
18. И.М. Лифшиц, М.И. Каганов, Л.В. Танатаров. К теории релаксационных изменений в металлах // *Атомная энергия.* 1959, т.6, с. 391–402.
19. М.И. Каганов, И.М. Лифшиц, Л.В. Танатаров. Релаксация между электронами и решеткой // *ЖЭТФ.* 1956, т. 31, № 2(8), с. 232–237.
20. И.М. Лифшиц. О температурных вспышках в среде, подверженной действию ядерного излучения // *ДАН СССР.* 1956, т.109, № 6, с. 1109–1111.
21. Я.Е. Гегузин, М.И. Каганов, И.М. Лифшиц. Влияние длины свободного пробега электронов на образование трека траектории заряженной частицы в металле // *ФТТ.* 1973, т. 15, № 8, с. 2425–2428.
22. А.А. Давыдов, А.И. Калиниченко. Механические эффекты вблизи ионных треков и термических пиков // *Вопросы атомной науки и техники. Серия «Физ. радиационных повреждений и радиационное материаловедение»* 1985. №3(36), с. 27–30.
23. C. Dufour, E. Lesellier de Chezelles, V. Delignon, M. Toulemonde. *Modifications induced by irradiation in glasses.* Ed. P. Massoldi, Amsterdam: North-Holland, 1992, p. 61.
24. C. Dufour, E. Paumier, M. Toulemonde // *Radiat. Eff. and Defects Solids.* 1993, v. 126, p. 119.
25. M.R.P. Waligorski, R.N. Hamm, R. Katz. The radial distribution of dose around the path of a heavy ion in liquid water // *Nucl. Tracks and Radiat. Meas.* 1986, v. 11, p. 306–319.
26. I.S. Bitensky, P. Dimirev, B.U. R. Sundquist. On model of fullerene formation from polymer under MeV ion impact // *Nucl. Instrum. and Meth. Phys. Res. B.* 1998, v. 82, p. 356–361.
27. A. Berthelot, F. Gourbilleau, C. Dufour, B. Domenges, E. Paumier. Irradiation of tin oxide nanometric powder with swift heavy ions // *Nucl. Instrum. and Meth. Phys. Res. B.* 2000, v. 166–167, p. 927–932.
28. M. Methfessel, D. Hennig, M. Scheffer. Trends of the surface relaxation, surface energies, and work functions of 4d transition metals // *Phys. Rev. B.* 1990, v. 46, N8, p. 4816–4829.
29. А.И. Глушцов, Ф.Ф. Комаров, А.П. Новиков, А.И. Урбанович, А.Т. Хоанг. Локальные тепловые процессы при торможении быстрых заряженных частиц в полупроводниковых кристаллах // *ДАН БССР.* 1987, т. 31, № 7, с. 609–611.

30. H.D. Weymann. Finite speed of propagation in heat conduction, diffusion, and viscous shear motion // *Amer. J. Phys.* 1967, v. 35, №6, p. 488–496.
31. А.П. Новиков, А.И. Урбанович, Н.В. Конг, О.С. Хадарина. Локальные тепловые и акустические процессы при торможении быстрых заряженных частиц в кристаллах // *Вестн. БГУ, сер.1.* 1992, №1, с. 10–13.
32. А.Ю. Дидык, В.Н. Робук, В.К. Семина. *Температура в треке тяжелого иона с высокими удельными ионизационными потерями энергии в модели термического пика в материалах*: Препринт ОИЯИ Р17-2003-30. Дубна, ОИЯИ, 2003, 34 с.
33. A.Missenard. *Conductivite thermique des solides, gaz et de leurs melanges*. Paris: Editions Eyrolles, 1965.
34. *Физические величины*. Справочник /Под ред. И.С. Григорьева, Е.З. Мейлиховой. М.: «Энергоатомиздат», 1991.
35. В.Н. Жарков, В.А. Калинин. *Уравнения состояния твердых тел при высоких давлениях и температурах*. М.: «Наука», 1968.
36. Ф.Ф. Комаров, А.П. Новиков, А.Ф. Буренков. *Ионная имплантация*. Минск: Изд. Университета, 1994, с. 249.
37. A. Berthelot, S. Hemon, F. Gourbilleau, C. Dufour, E. Dooryhee, E. Paumier. Nanometric size effects on irradiation of tin oxide powder // *Nucl. Instrum. and Meth. Phys. Res. B.* 1998, v. 146, №1–4, p. 437–442.
38. А.А. Тихонов, А.И. Самарский. *Уравнения математической физики*. М.: «Наука», 1977.
39. Б.М. Будак, А.А. Самарский, А.А. Тихонов. *Сборник задач по математической физике*. М.: «Наука», 1972.
40. А.А. Самарский, А.В. Гулин. *Устойчивость разностных схем*. М.: «Наука», 1973.
41. F. Seitz, J.S. Koehler // *Solid State Phys.* 1956, v.2, p. 251.
42. G.H.Vineyard. Thermal spikes and activated processes // *Radiat. Eff.* 197, v. 29, №4, p. 245–248.
43. M. Nastasi, J.W. Mayer. Ion beam mixing and liquid interdiffusion // *Radiat. Eff. and Defects Solids.* 1994, v. 130–131, p. 367–385.

ВИКОРИСТУВАННЯ МОДЕЛІ ТЕРМІЧНОГО ПІКУ В ТРЬОХМІРНІЙ ГРАТЦІ ПРИ ОПРОМІНЮВАННІ ВАЖКИМИ ІОНАМИ ВИСОКИХ ЕНЕРГІЙ

О.Ю. Дидик, В.М. Робук, В.К. Семіна, А. Халил, А. Хофман

Розглянута модель термічного піку в матеріалах при опромінюванні швидкими важкими іонами з високими удільними непружними втратами енергії при обліку залежності температури вздовж траєкторії іона. В даній температурній моделі отримані численні рішення системи порівнянь для температур ґратки та електронів при наявності можливого розогрева ґратки до температур плавлення та випарювання, а саме з двома фазовими переходами. Введен тиск в області трека важкого іона та розглянуто його вплив на змінення термодинамічних параметрів ґратки. Проведен численний аналіз із використанням приближних виражень для температури ґратки.

THE USE OF THERMAL SPIKE MODEL IN THREE DIMENSIONAL LATTICE UNDER IRRADIATION BY HIGH ENERGY HEAVY IONS

A.Yu. Didyk, V.N. Robuk, V.K. Semina, A. Khalil, A. Hofman

The model of thermal spike in materials under irradiation by swift heavy ions with the high specific inelastic energy loss at the taking into account of temperature along the ion trajectory is considered. The numerical solutions of system of equations for the temperatures of lattice and electrons with taking into account possible heating of lattice up to melting and evaporation temperatures, it means – with the two phase transitions are obtained. The pressure in area around the heavy ion track is introduced and it's influence on thermodynamical parameters of lattice is considered. The numerical analysis with the use of approximating expressions for lattice temperature is carried out.