

ВЛИЯНИЕ КУЛОНОВСКОГО ВЗРЫВА НА ПРОЦЕСС ОБРАЗОВАНИЯ ТРЕКОВ В МЕТАЛЛАХ ПРИ ОБЛУЧЕНИИ ТЯЖЕЛЫМИ ИОНАМИ

А. И. Рязанов*, С. А. Павлов, Е. В. Метелжин, А. В. Жемерев

Российский научный центр «Курчатовский институт»
123182, Москва, Россия

Поступила в редакцию 5 июля 2004 г.

Существующее в настоящее время рассмотрение образования треков в металлах под действием облучения тяжелыми ионами основывается в основном на модели тепловой вспышки (T -вспышки) [1, 2], которая в ряде случаев не позволяет объяснить возникновение высоких температур в материалах при облучении тяжелыми ионами (например, в меди [2]). В настоящей работе проведен сравнительный анализ образования треков в металлах под действием облучения тяжелыми ионами с использованием двух моделей: кулоновского взрыва и T -вспышки, в рамках которых найдены изменения температур электронной и ионной подсистем в трековых областях при облучении аморфного металлического сплава ($\text{Fe}_{85}\text{V}_{15}$) и металла (меди) быстрыми тяжелыми ионами с одинаковыми энергиями ($E > 1$ МэВ/нукл.). Здесь же для сравнения приведены результаты расчетов разогрева электронной и ионной подсистем в металлах для различных модификаций модели T -вспышки. Анализ полученных результатов показывает, что использование модели кулоновского взрыва для расчета разогрева ионной и электронной подсистем приводит к более сильному разогреву ионной подсистемы в трековой области и образованию области проплава по сравнению с аналогичными результатами, полученными в рамках модели T -вспышки. Здесь же приведены также расчеты образования точечных дефектов в Cu благодаря ионизационным потерям в рамках использования моделей кулоновского взрыва и T -вспышки. Проведено сравнение этих расчетов с экспериментальными данными, которое показывает, что модель кулоновского взрыва более адекватно описывает образование треков в металлах по сравнению с T -вспышкой.

PACS: 81.40.Wx, 73.50.Bk

1. ВВЕДЕНИЕ

При торможении в материале быстрой тяжелой заряженной частицы с энергиями $E > 1$ МэВ/нукл. более 90 % этой энергии передается в электронную подсистему за счет электронного торможения и лишь порядка 10 % энергии передается непосредственно атомам кристаллической решетки материала в результате упругих столкновений тяжелых ионов с атомами решетки. Последующий разогрев материала происходит за счет передачи энергии от электронов к ионам в результате процессов, описываемых в рамках моделей T -вспышки [1, 2] и кулоновского взрыва [3]. В результате этих процессов температура ионной подсистемы может дости-

гать существенных величин: температуры плавления для металлов и температуры кристаллизации для аморфных сплавов.

Облучение тяжелыми ионами с высокой степенью ионизационных потерь может приводить также к образованию точечных дефектов с аномально высокой концентрацией [4]. Образование точечных дефектов с такой высокой концентрацией определяется в основном ионизационными тормозными потерями, а не упругими столкновениями тяжелых ионов с атомами кристаллической решетки, вклад которых в процесс образования точечных дефектов на порядки меньше по сравнению с вкладом ионизационных потерь. Тем самым, физические свойства металлических систем в трековых областях будут существенно отличаться от их свойств вдали от треков.

Рассмотрим кратко физические механизмы разо-

*E-mail: ryazanoff@comail.ru

грева электронной и ионной подсистем материала при пролете через него быстрой тяжелой заряженной частицы в рамках моделей T -вспышки и кулоновского взрыва.

Суть модели T -вспышки заключается в том, что быстрая тяжелая заряженная частица, пролетающая через материал, в результате электронных тормозных потерь передает около 90 % своей энергии электронной подсистеме материала и лишь малую оставшуюся часть энергии передает непосредственно ионной подсистеме материала благодаря упругим столкновениям. Тем самым в электронной подсистеме существует эффективный источник энергии в области оси трека, который затем благодаря электронной теплопроводности приводит к разогреву электронной подсистемы на расстояниях, больших по сравнению с размерами трека (характерное время термализации электронной подсистемы в металле порядка 10^{-15} с). В дальнейшем благодаря электрон-фононному взаимодействию электроны передают часть своей энергии ионам решетки (характерное время электрон-фононного взаимодействия в металле порядка 10^{-13} с), что и приводит к разогреву ионной подсистемы. Отсюда следует, что электроны термализуются за времена, значительно меньшие по сравнению с характерными временами теплообмена между электронами и ионной подсистемой.

Наличие разных модификаций моделей T -вспышки [1, 2] объясняется различием механизмов процесса разогрева электронной подсистемы материала и использованием различных выражений для электрон-фононного взаимодействия (обменные члены) в уравнениях теплового баланса. В работе [2] принято, что эффективный источник энергии в электронной подсистеме играет роль начального условия для температуры электронов, а в самих уравнениях теплового баланса присутствует лишь обменный член, связанный с теплообменом между электронной и ионной подсистемами. В работе [1] принято, что эффективный источник энергии в электронной подсистеме будет действовать в течение всего времени термализации электронной подсистемы и будет представлен в уравнениях теплового баланса в виде дополнительного слагаемого.

Рассмотрим теперь кратко механизм разогрева ионной и электронной подсистем в рамках модели кулоновского взрыва, которая используется в настоящей работе для описания процесса разогрева ионной и электронной подсистем. Сама модель кулоновского взрыва и область ее применимости подробно изложены в работе [3]. Здесь мы лишь приведем описание физических процессов, которые приводят к

дополнительному разогреву ионной и электронной подсистем в рамках этой модели. При пролете быстрой тяжелой заряженной частицы через материал при взаимодействии тяжелых ионов с электронами выбиваются δ -электроны, которые движутся в основном в радиальном направлении по отношению к траектории тяжелого иона (оси трека). В результате этого в течение характерного времени существования тока δ -электронов возникает эффективное электрическое поле, величина и характер пространственного распределения которого были найдены в работе [3]. Ионы кристаллической решетки и электроны материала, находящиеся в зоне действия этого поля, приобретают дополнительный импульс и, соответственно, дополнительную кинетическую энергию. Таким образом, в этой модели существует механизм, позволяющий увеличить среднюю кинетическую энергию и в конечном итоге начальную температуру не только электронов, но и ионов за счет энергии, получаемой электронами и ионами в течение короткого времени существования эффективного электрического поля.

В данной работе в рамках моделей T -вспышки и кулоновского взрыва проведено исследование разогрева электронной и ионной подсистем в трековых областях для аморфного металлического сплава $\text{Fe}_{85}\text{V}_{15}$ и меди. Все численные расчеты, используемые при решении соответствующих нелинейных уравнений, проводились с использованием метода «неявной схемы» и «метода прогонки». Используемые методы являются достаточно устойчивыми. Примеры их применения для решения подобных задач можно найти в работе [1, 8].

Влияние различных механизмов разогрева электронной и ионной подсистем в различных модификациях модели T -вспышки учитывается введением различных обменных членов в уравнения теплового баланса для электронов и ионов [1, 2], и оно проанализировано ниже на основе проведенных численных расчетов для аморфного металлического сплава $\text{Fe}_{85}\text{V}_{15}$ в рамках этих моделей. Использование различных модификаций моделей T -вспышки для расчета разогрева и температуры ионной подсистемы сплава $\text{Fe}_{85}\text{V}_{15}$ показало, что при выборе соответствующих параметров облучения температура ионной подсистемы в этом сплаве может достигать значения температуры плавления (температуры кристаллизации). В результате в этом сплаве может образовываться область проплава вокруг траектории быстрого тяжелого иона (см. также [1]).

Применение модели T -вспышки для расчета разогрева ионной подсистемы в меди показывает,

что температура ионной подсистемы не может резко увеличиваться и достигать температуры плавления, и она возрастает не более чем на 100 К (см. также [2]). Использование же модели кулоновского взрыва в численных расчетах показало, что температура ионной подсистемы может достигать температуры плавления и в меди также образуется область проплава в зоне трека.

2. ПРИМЕНЕНИЕ МОДЕЛИ T -ВСПЫШКИ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ ИЗМЕНЕНИЯ ТЕМПЕРАТУР ЭЛЕКТРОННОЙ И ИОННОЙ ПОДСИСТЕМ В ТРЕКОВЫХ ОБЛАСТЯХ ПРИ ОБЛУЧЕНИИ МЕТАЛЛОВ БЫСТРЫМИ ТЯЖЕЛЫМИ ИОНАМИ

Выпишем систему нелинейных уравнений переноса тепла электронной и ионной подсистем в металле вблизи трека, создаваемого быстрой тяжелой заряженной частицей для цилиндрической геометрии распределения этих температур по отношению к траектории быстрой частицы (оси трека). Учитывая предложенные ранее в работах [1, 2] различные модификации модели T -вспышки, уравнения теплопроводности для электронной и ионной подсистем можно записать в следующем виде:

$$C_e(T_e) \frac{\partial T_e}{\partial t} = \operatorname{div} (K_e(T_e) \nabla T_e) - \gamma(T_e)[T_e - T_i] + A(r, t), \quad (1)$$

$$C_i(T_i) \frac{\partial T_i}{\partial t} = \operatorname{div} (K_i(T_i) \nabla T_i) + \gamma[T_e - T_i]. \quad (2)$$

Здесь T_e , T_i — температура электронной и ионной подсистем материала; C_e , K_e ; C_i , K_i — теплоемкость и теплопроводность электронов в материале и, соответственно, теплоемкость и теплопроводность ионов материала, нелинейным образом зависящие от температуры; r — расстояние от оси трека; $\gamma[T_e - T_i]$ — обменный член, учитывающий теплообмен между электронной и ионной подсистемами облучаемого материала за счет электрон-фононного взаимодействия; $A(r, t)$ — эффективный источник энергии в электронной подсистеме, связанный с тормозными электронными потерями быстрой тяжелой заряженной частицы в металле.

Нелинейный вид функциональной зависимости теплоемкости и теплопроводности электронной и ионной подсистем от температуры для меди и сплава $\text{Fe}_{85}\text{V}_{15}$, использовавшийся в расчетах, приведен в Приложении.

Рассмотрим в первую очередь модификацию модели T -вспышки, предлагаемую в работе [2]. В этой модели коэффициент γ в обменном члене, учитывающем электрон-фононное взаимодействие в уравнениях теплового баланса (1), (2), равен $\gamma = C_e/\tau$, где τ — характерное время электрон-фононного взаимодействия ($\tau = 10^{-13}$ с).

Граничные условия для электронной и ионной подсистем вдали от оси трека учитывают отсутствие нагрева материала вдали от трека и они записываются в виде

$$T_e|_{r \rightarrow \infty} = T_i|_{r \rightarrow \infty} = T_{\text{matr}},$$

где $T_{\text{matr}} = 10$ К — температура матрицы металла.

Начальное условие для распределения температуры в электронной подсистеме определяется с помощью тормозных электронных потерь для тяжелых ионов и имеет вид [2]

$$E_e(t=0) = \frac{Q}{4\pi\sigma^2} \exp\left(-\frac{r^2}{4\sigma^2}\right) + \int_0^{10 \text{ К}} C_e dT, \quad (3)$$

$$\sigma^2 = \left(\frac{L}{2 \ln 2}\right), \quad (4)$$

где E_e — объемная плотность электронной энергии; Q — электронные тормозные потери для быстрой тяжелой заряженной частицы на единицу длины; L — полуширина пространственного распределения выделившейся энергии в электронной подсистеме (в наших расчетах согласно [2] она равна $L = 2$ нм). С другой стороны, плотность электронной энергии в начальный момент времени можно представить в следующем виде:

$$E_e(t=0) = \int_0^{T_e(t=0)} C_e dT, \quad (5)$$

где $T_e(t=0)$ — начальная температура электронной подсистемы. Приравнявая значения плотностей электронной энергии (5) и (3), получим уравнение для определения начальной температуры электронной подсистемы при пролете через материал быстрой тяжелой заряженной частицы:

$$\int_0^{T_e(t=0)} C_e dT = \frac{Q}{4\pi\sigma^2} \exp\left(-\frac{r^2}{4\sigma^2}\right) + \int_0^{10 \text{ К}} C_e dT.$$

Решение данного уравнения представляет собой начальное условие для температуры электронной подсистемы. Начальная температура ионной подсистемы совпадает с температурой материала в отсутствие облучения T_{matr} :

$$T_i(t=0) = T_{\text{matr}}.$$

Надо отметить, что в обеих модификациях модели T -вспышки подразумеваются еще два граничных условия для электронной и ионной температур:

$$\left. \frac{\partial T_e}{\partial t} \right|_{r=0} = \left. \frac{\partial T_i}{\partial t} \right|_{r=0} = 0,$$

учитывающие отсутствие тепловых потоков на оси трека.

Рассмотрим модификацию модели T -вспышки, предлагаемую в работе [1]. В этой модели коэффициент γ имеет вид $\gamma = g$, где g в процессе вычислений считается константой. В наших вычислениях $g = 5 \cdot 10^{12}$ Вт/К · см³ (см. [1, 8]). Таким образом, в данной модели член, учитывающий электрон-фононное взаимодействие, пропорционален разности температур электронной и ионной подсистем и не учитывает нелинейную температурную зависимость количества тепла, переданного от электронной подсистемы в ионную. В работе [2] эта нелинейная зависимость от температуры учитывается, поскольку нелинейность здесь связана с наличием температурной зависимости коэффициента g в электрон-фононном взаимодействии.

Граничные и начальные условия для распределения электронной и ионной температур вдали от трека и в начальный момент времени записываются в следующем виде:

$$T_e|_{r \rightarrow \infty} = T_i|_{r \rightarrow \infty} = 100 \text{ К},$$

$$T_e(t = 0) = T_i(t = 0) = 100 \text{ К}.$$

Здесь предполагается, что температура матрицы в этом случае $T_{matr} = 100$ К.

Разогрев электронной и, соответственно, ионной подсистем, происходит за счет наличия в уравнении для распределения температуры электронной подсистемы (1) эффективного источника энергии $A(r, t)$, связанного с тормозными потерями быстрой тяжелой заряженной частицы, проходящей через материал. Главное отличие от модели T -вспышки, рассмотренной в работе [2], заключается в том, что в данном случае предполагается постепенный разогрев электронной подсистемы в течение характерного времени t_0 (где $t_0 = 10^{-15}$ с — характерное время термализации электронной подсистемы) и затем последующее охлаждение. Таким образом, несмотря на то что время термализации электронов значительно меньше времени электрон-фононного взаимодействия, в работе [1] учитывается тот факт, что наряду с разогревом ионной подсистемы происходит одновременно постепенный разогрев и электронной подсистемы. Выражение для эффективного источника энергии $A(r, t)$ имеет вид [1]

$$A(r, t) = \begin{cases} C_1 \left(\frac{dE}{dz} \right)_e \exp \left(-\frac{r}{r_0} - \frac{(t - t_0)^2}{2\sigma_t^2} \right) & \text{при } t < 2t_0, \\ 0 & \text{при } t > 2t_0, \end{cases} \quad (6)$$

где $(dE/dz)_e$ — электронные тормозные потери энергии быстрой тяжелой заряженной частицы; $\sigma_t = t_0$; $r_0 = 2.5$ нм — характерное расстояние, определяющее размер области выделения энергии в электронной подсистеме. Константа C_1 находится из следующего условия нормировки [1]:

$$2\pi C_1 \int_0^\infty r dr \int_0^{2t_0} dt \exp \left(-\frac{r}{r_0} - \frac{(t - t_0)^2}{2\sigma_t^2} \right) = 1.$$

Проанализируем целесообразность использования модели T -вспышки с учетом постепенного процесса разогрева электронной подсистемы и учета нелинейности обменного члена в уравнениях теплового баланса.

Результаты расчетов для временной зависимости изменения температуры ионной подсистемы для аморфного сплава Fe₈₅B₁₅, проведенные с использованием модели T -вспышки [1], в случае, когда тор-

мозные потери составляют $(dE/dz)_e = 40$ кэВ/нм и разогрев электронной подсистемы в уравнении (1) определяется эффективным источником $A(r, t)$ согласно выражению (6), представлены на рис. 1. Как видно из полученных результатов, в случае сплава Fe₈₅B₁₅ применение модели T -вспышки согласно [1] приводит к образованию в нем локальных областей проплава.

Так как отдельные механизмы, заложенные в различные модификации моделей T -вспышки [1, 2], не совпадают, представляет интерес вопрос выяснения влияния различий модификаций этих моделей на конечный результат, т. е. на распределение температуры ионной подсистемы вблизи трека для различных моментов времени. Для этого были отдельно проведены численные расчеты для сплава Fe₈₅B₁₅ с использованием модификации модели T -вспышки, используемой в работе [2].

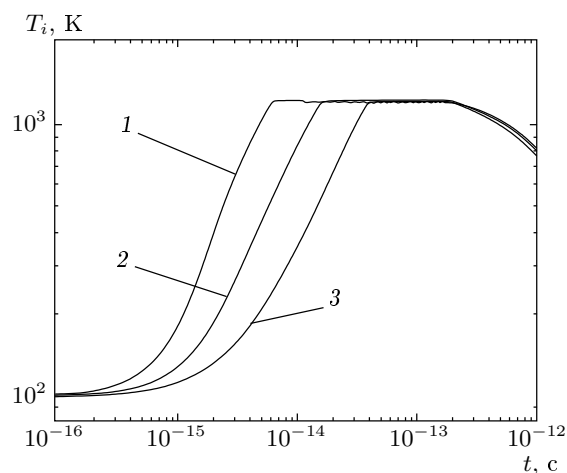


Рис. 1. Зависимость изменения температуры ионной подсистемы от времени в трековой области в аморфном сплаве $\text{Fe}_{85}\text{V}_{15}$, облучаемом быстрыми тяжелыми заряженными частицами. Различные кривые соответствуют временным изменениям температуры ионной подсистемы на различных расстояниях от оси трека $r = 0, 5, 10$ нм (кривые 1, 2, 3). Температура ионной подсистемы сплава рассчитывается в рамках модификации модели T -вспышки, предложенной в работе [1]

Вначале был изменен способ разогрева электронной подсистемы (см. [1]), а вид обменного члена при этом не менялся (см. [2]). Полученные при этом результаты представлены на рис. 2. Из результатов расчета видно, что применение второго способа разогрева электронной подсистемы [1] приводит к большему разогреву ионной подсистемы, что отражается на длительности процесса плавления. Это неудивительно, так как в первой модели разогрева электронной подсистемы существовал всплеск энергии в начальный момент времени и при этом происходило расширение во времени области высоких температур в электронной подсистеме [2]. Во второй модели разогрева рассматривается источник энергии, который эффективно действует в электронной подсистеме в течение времени термализации [1]. Однако различия в величинах разогрева ионной подсистемы не столь существенные, что объясняется значительно большим временем электрон-фононного взаимодействия по сравнению со временем термализации электронов. Таким образом, процесс теплообмена между электронной и ионной подсистемами материала в незначительной степени зависит от механизма разогрева электронной подсистемы, будь то постепенный (см. [1]) или мгновенный (см. [2]) разогрев электро-

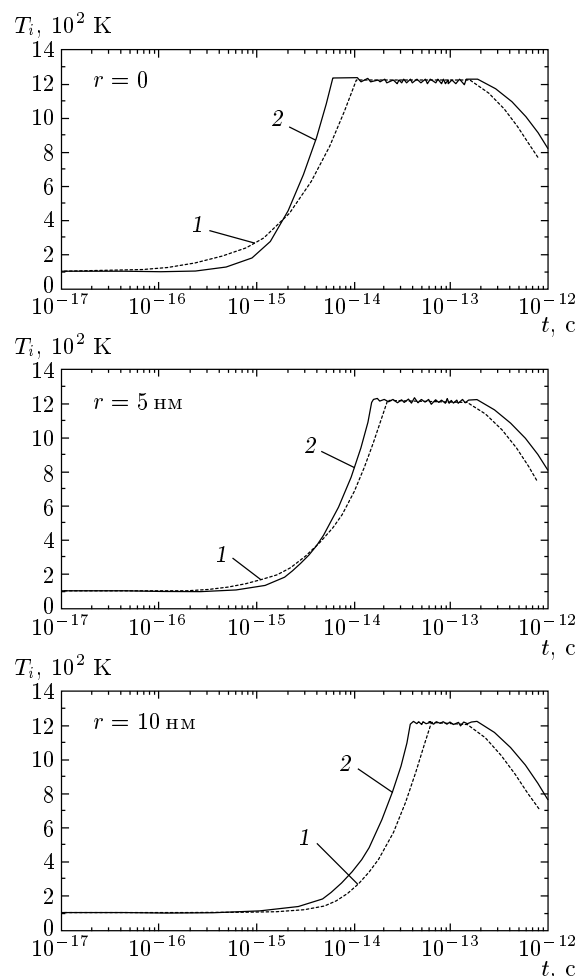


Рис. 2. Зависимость температуры ионной подсистемы сплава $\text{Fe}_{85}\text{V}_{15}$, облучаемого тяжелыми заряженными частицами, от времени на различных расстояниях от оси трека $r = 0, 5, 10$ нм. Расчет температуры проводился с использованием модифицированной модели T -вспышки: обменный член в уравнениях теплового баланса брался из работы [2]; разогрев электронной подсистемы описывался моделью T -вспышки согласно работе [2] (кривая 1). Результаты расчетов, полученные при учете разогрева электронной подсистемы, описываемой моделью T -вспышки согласно [1] (кривая 2)

нов.

Теперь рассмотрим второй случай, когда способ разогрева выбран согласно первой модели [2], а вид обменного члена — согласно второй модели [1]. Полученные результаты приведены на рис. 3. Как видно из полученных результатов, применение различных видов обменных членов приводит к различным значениям для скоростей разогрева ионной подсистемы. Времена, в течение которых происходит про-

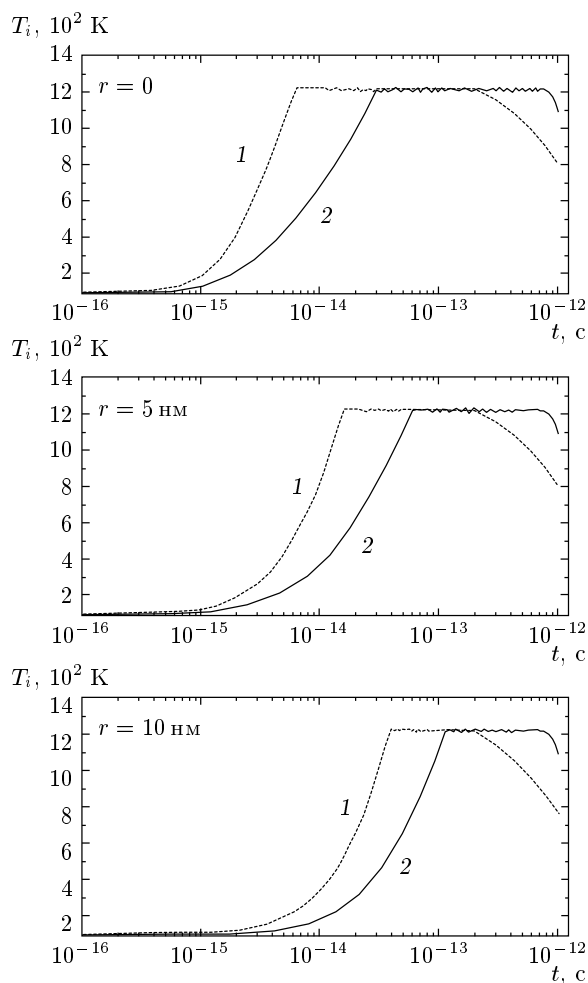


Рис. 3. Зависимость температуры ионной подсистемы сплава $Fe_{85}V_{15}$, облучаемого тяжелыми заряженными частицами, от времени для различных расстояний от оси трека $r = 0, 5, 10$ нм. Расчет температуры проводился с использованием модифицированной модели T -вспышки: разогрев электронной подсистемы описывался моделью T -вспышки согласно работе [2], а обменный член в уравнениях теплового баланса брался из работы [1] (кривая 1). Результаты расчетов при использовании обменного члена в уравнениях теплового баланса согласно работе [2] (кривая 2)

плав, примерно одинаковы, что позволяет сделать вывод о том, что количество энергии, передаваемой ионной подсистеме со стороны электронной подсистемы, одинаково. Различия в скоростях разогрева ионной подсистемы объясняются тем, что в работах [1, 2] предполагается различный вид температурной зависимости обменного члена в уравнениях теплового баланса. При выборе температурной зависи-

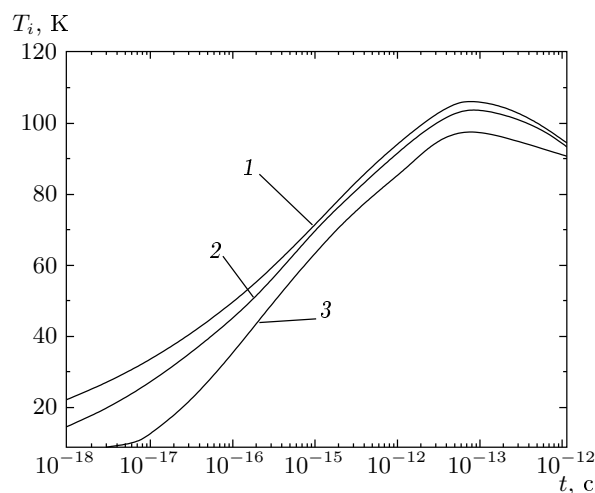


Рис. 4. Зависимость изменения температуры ионной подсистемы от времени в трековой области Cu , облучаемой быстрыми тяжелыми заряженными частицами. Различные кривые соответствуют временным изменениям температуры ионной подсистемы на различных расстояниях от оси трека $r = 0, 5, 10$ нм (кривые 1, 2, 3). Температура ионной подсистемы сплава рассчитывается в рамках модификации модели T -вспышки, предложенной в работе [2]

мости обменного члена следует особо обратить внимание на поведение теплоемкости электронной подсистемы материала в рассматриваемом диапазоне температур для электронной подсистемы. В данном случае анализ температурной зависимости теплоемкости электронов C_e для сплава $Fe_{85}V_{15}$ показывает, что целесообразнее выбирать обменный член в виде, предложенном в работе [2], т. е. учитывать при расчетах теплообмена между электронной и ионной подсистемами нелинейную температурную зависимость обменного члена.

Полученные результаты позволяют сделать вывод, что значительных различий в результатах расчетов для распределения температуры ионной подсистемы в области трека при использовании различных модификаций моделей T -вспышки [1, 2] не существует. Некоторые различия связаны с временной детализацией этого процесса.

Результаты расчетов изменения температуры в ионной подсистеме для меди, проведенные с использованием модели T -вспышки из [2], когда эффективный источник энергии в электронной подсистеме $A(r, t) = 0$ (см. (1)), $Q = 100$ кэВ/нм и начальный разогрев электронов определяется уравнением

(5), приведены на рис. 4. Из полученных результатов видно, что разогрев ионной подсистемы в модели T -вспышки невелик и не приводит к образованию локальных областей проплава в зоне трека.

3. ПРИМЕНЕНИЕ МОДЕЛИ КУЛОНОВСКОГО ВЗРЫВА ДЛЯ АНАЛИЗА ИЗМЕНЕНИЯ ТЕМПЕРАТУР В ИОННОЙ И ЭЛЕКТРОННОЙ ПОДСИСТЕМАХ И ОБРАЗОВАНИЯ ТОЧЕЧНЫХ ДЕФЕКТОВ В ТРЕКОВЫХ ОБЛАСТЯХ БЛАГОДАРЯ ИОНИЗАЦИОННЫМ ТОРМОЗНЫМ ПОТЕРЯМ ПРИ ОБЛУЧЕНИИ МЕДИ БЫСТРЫМИ ТЯЖЕЛЫМИ ИОНАМИ

Как было показано выше, применение модели T -вспышки для описания процесса разогрева ионной подсистемы меди приводит к незначительному возрастанию температуры ионной подсистемы в области трека и области проплава в ней не образуются. Таким образом, существенный интерес представляет проведение исследования разогрева ионной подсистемы в меди при торможении в ней быстрых тяжелых заряженных ионов с использованием модели кулоновского взрыва. Поскольку именно в этом случае легко провести сравнительный анализ результатов, полученных в рамках двух моделей, T -вспышки и кулоновского взрыва, с использованием в расчетах одних и тех же тормозных потерь быстрых тяжелых ионов и других констант, а также определить при этом влияние на конечные результаты расчетов вкладов различных физических механизмов, используемых в этих моделях.

В работе [3] в рамках модели кулоновского взрыва представлена методика расчета пространственного распределения радиального электрического поля $E_\rho(\rho)$ (ρ — расстояние от оси трека в плоскости, перпендикулярной направлению движения тяжелой заряженной частицы), возникающего при торможении быстрой тяжелой заряженной частицы в материале. Далее в работе [3] была проведена оценка кинетической энергии $\Delta\varepsilon$, приобретаемой ионами материала в этом поле в течение характерного времени существования этого поля t_r ($t_r \sim 10^{-15}$ – 10^{-16} с), и она имеет вид

$$\Delta\varepsilon(\rho) = \frac{(\Delta p)^2}{2M} = \frac{(eZE_\rho t_r)^2}{2M}. \quad (7)$$

Здесь M — масса иона решетки, eZ — заряд иона решетки, Δp — импульс ионов, приобретаемый ими в эффективном электрическом поле $E_\rho(\rho)$ в течение времени t_r .

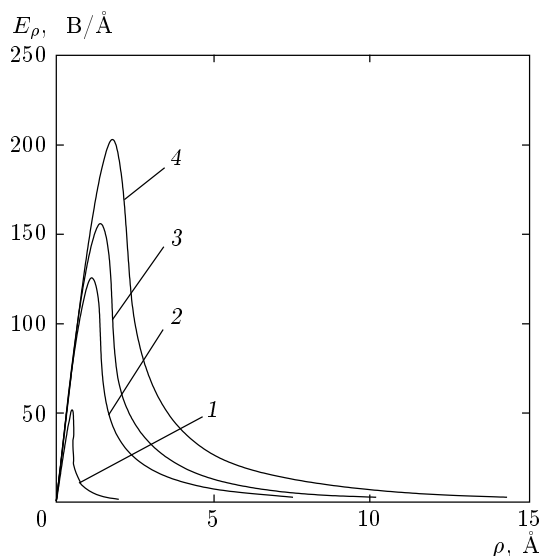


Рис. 5. Пространственные зависимости напряженности электрического поля, образующегося при торможении различных ионов с энергией 10 МэВ/нукл. в меди, в момент времени t_r : 1 — $Z_1 = 8$, 2 — $Z_1 = 36$, 3 — $Z_1 = 54$, 4 — $Z_1 = 92$

Поскольку в масштабе времен порядка t_r термализация ионов не успевает произойти, будем считать, что начальная температура ионов определяется средней кинетической энергией ионов, получаемой ими в электрическом поле. Таким образом, начальную температуру ионной подсистемы, которая возникает под действием разогрева от короткоживущего электрического поля $E_\rho(\rho)$ и устанавливается достаточно быстро, в модели кулоновского взрыва можно представить в виде

$$k_B T_i(\rho, t = 0) = \Delta\varepsilon(\rho), \quad (8)$$

где k_B — постоянная Больцмана.

На рис. 5 представлены результаты расчетов пространственной зависимости напряженности электрического поля, образующегося при торможении ионов кислорода ($Z_1 = 8$), криптона ($Z_1 = 36$), ксенона ($Z_1 = 54$) и урана ($Z_1 = 92$) с энергией 10 МэВ/нукл. в меди, в момент времени $t = t_r$. Расчеты проводились по методике, изложенной в [3]. Из результатов расчета видно, что с ростом порядкового номера движущегося иона величина электрического поля резко возрастает, достигая для ионов урана максимальной величины примерно 200 В/А.

На рис. 6 представлено распределение кинетической энергии, приобретаемое ионами решетки под действием электрического поля, полученное с уче-

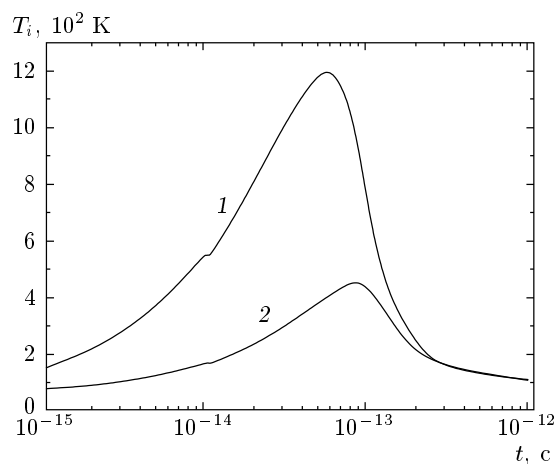


Рис. 6. Результаты расчетов разогрева ионной подсистемы в трековой области в меди в зависимости от времени при использовании модели кулоновского взрыва и учета разогрева электронной подсистемы за счет электронных тормозных потерь ($dE/dx = 100$ кэВ/нм) с использованием модели T -вспышки при облучении ее быстрыми тяжелыми ионами (Kr). Кривая 1 — $r = 5 \text{ \AA}$, кривая 2 — $r = 10 \text{ \AA}$

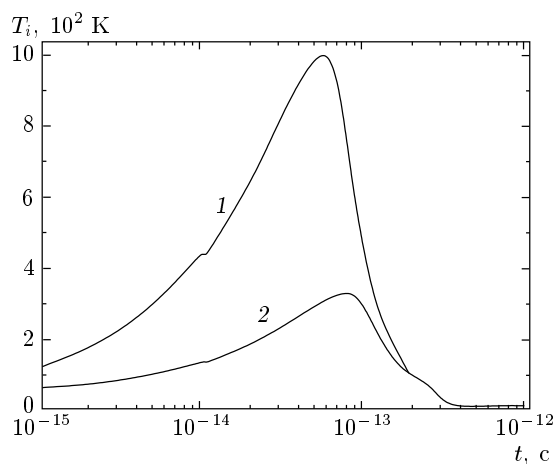


Рис. 7. Результаты расчетов разогрева ионной подсистемы в трековой области в меди в зависимости от времени при использовании модели кулоновского взрыва при облучении ее быстрыми тяжелыми ионами (Kr). Электронная температура в этих расчетах принималась равной температуре матрицы (100 К). Кривая 1 — $r = 5 \text{ \AA}$, кривая 2 — $r = 10 \text{ \AA}$

том соотношения (7) и результатов для напряженности электрического поля, представленных на рис. 5.

Рассмотрим наиболее «неблагоприятный» случай для изменения температуры в ионной подсистеме, когда модель кулоновского взрыва применяется только для расчета разогрева ионной подсистемы, т. е. начальная температура ионов определяется выражением (8), а начальная температура электронов не изменяется и определяется выражением

$$T_e(t = 0) = T_{matr} = 100 \text{ К}. \quad (9)$$

Результаты соответствующих расчетов для пространственного распределения температуры ионной подсистемы в меди в трековой области при облучении ее быстрыми ионами криптона ($Z_1 = 36$) с энергией $E = 10$ МэВ/нукл. представлены на рис. 7. На рис. 6 и 7 видно, что использование модели кулоновского взрыва для расчета разогрева ионной и электронной подсистем в трековой области приводит к более сильному разогреву и более резкому увеличению температуры ионной подсистемы в этой области по сравнению с аналогичными результатами, полученными в рамках модели T -вспышки. Достижимые при этом температуры ионной подсистемы могут приводить к образованию области проплава в металлах.

Рассмотрим теперь влияние кулоновского взрыва на образование точечных дефектов в меди при облучении тяжелыми ионами. Как уже отмечалось ранее, в работе [4] наблюдалось образование аномально точечных дефектов в Cu и Ag при облучении их тяжелыми ионами с тормозными потерями в интервале от 0.1 до 100 КэВ/нм, которое существенно выше по сравнению с образованием точечных дефектов, благодаря упругим столкновениям тяжелых ионов с атомами кристаллической решетки. Так, в меди при облучении ее тяжелыми ионами, имеющими электронные тормозные потери $S_e \approx 100$ кэВ/нм, число точечных дефектов на единицу длины пробега тяжелого иона (один микрон) составляет величину $N \sim 10^3-10^4$ мкм⁻¹. Поэтому определим изменение концентрации точечных дефектов в зависимости от величины электронных тормозных потерь S_e тяжелых ионов в рамках моделей кулоновского взрыва и T -вспышки и сравним полученные результаты с экспериментальными величинами. Полное число N точечных дефектов, созданное одним тяжелым ионом благодаря термическим флуктуациям при температуре $T(\rho, t)$ за характерное время остывания трека τ на единицу длины пробега тяжелого иона в цилиндрической области вблизи траектории тяжелого иона, равно

$$N = N_0 \nu_0 2\pi \int_0^{\rho_0} \rho d\rho \int_0^{\tau} \exp\left(-\frac{E_f}{kT(\rho, t)}\right) dt. \quad (10)$$

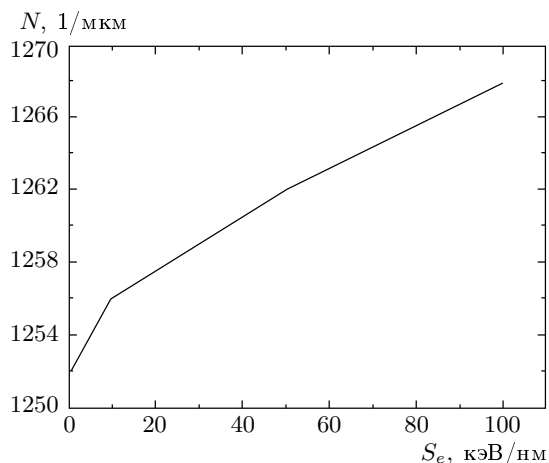


Рис. 8. Полное число точечных дефектов N , созданных одним тяжелым ионом благодаря термическим флуктуациям при температуре $T(\rho, t)$ за характерное время остывания трека на единицу длины пробега тяжелого иона в трековой области, полученное в рамках модели кулоновского взрыва

Здесь N_0 — плотность атомов в материале, ν_0 — частота Дебая, E_f — энергия образования вакансии в материале. Далее в расчетах числа образующихся точечных дефектов в трековой области в Cu благодаря термофлуктуациям использовались следующие величины: $N_0 = 8.5 \cdot 10^{28} \text{ м}^{-3}$, $\nu_0 = 10^{13} \text{ с}^{-1}$, $\rho_0 \approx 10^{-7} \text{ м}$, $\tau \approx 10^{-10} \text{ с}$, $E_f = 3 \text{ эВ}$. Результаты расчетов зависимости полного числа образующихся точечных дефектов в трековой области в Cu от величины тормозных потерь S_e согласно соотношению (10) в рамках модели кулоновского взрыва приведены на рис. 8. Видно, что при величине тормозных потерь порядка $S_e \approx 100 \text{ кэВ}/\text{нм}$ число образующихся точечных дефектов от одного иона на единицу длины трека составляет величину порядка $N \approx 1.3 \cdot 10^3 \text{ мкм}^{-1}$, что близко к экспериментально наблюдаемым значениям для Cu [4]. Подобные вычисления, проведенные в рамках модели T -вспышки согласно соотношению (10) с использованием температурной зависимости, полученной ранее для модели T -вспышки, где максимальная температура ионов в трековой области порядка 110 К (см. рис. 4), дают величины для концентраций точечных дефектов в трековой области на три порядка меньше по сравнению с аналогичными результатами расчетов в рамках модели кулоновского взрыва, где максимальная температура ионов порядка $T \approx 10^3 \text{ К}$, (см. рис. 6). Поэтому можно сделать вывод, что модель кулоновского взрыва дает более

близкие к эксперименту величины для числа образующихся точечных дефектов в трековой области по сравнению с аналогичными расчетами в рамках модели T -вспышки. Это указывает на то, что модель кулоновского взрыва более адекватно описывает образование треков при облучении тяжелыми ионами по сравнению с моделью T -вспышки.

4. ВЫВОДЫ

Проведен анализ разогрева электронной и ионной подсистем в трековых областях при облучении меди и аморфного металлического сплава $\text{Fe}_{85}\text{V}_{15}$ быстрыми тяжелыми ионами с использованием двух теоретических моделей образования треков: модели кулоновского взрыва и T -вспышки. В рамках этих моделей получено пространственное распределение температур в ионной и электронной подсистемах в треках этих материалов при облучении тяжелыми ионами в различные моменты времени. Проанализированы различные модификации модели T -вспышки, используемые в расчетах образования треков и различающиеся некоторыми способами разогрева электронной подсистемы и видом обменных членов в уравнении теплового баланса, описывающих электрон-фононное взаимодействие. В работе проведено численное сравнение разогрева ионной подсистемы аморфного сплава $\text{Fe}_{85}\text{V}_{15}$ для двух предложенных модификаций модели T -вспышки. Полученные результаты позволяют сделать вывод о том, что модификации этих моделей не приводят к значительным изменениям ионной температуры в этом сплаве при облучении тяжелыми ионами. Были проведены также расчеты для разогрева ионной подсистемы в меди при использовании сочетания моделей кулоновского взрыва и T -вспышки. Показано, что использование модели кулоновского взрыва для описания образования треков в металлах (меди) приводит к более сильному разогреву ионной подсистемы и образованию проплава в трековой области при облучении тяжелыми ионами по сравнению с аналогичными результатами, полученными в рамках модели T -вспышки. Проведены также расчеты изменения концентрации точечных дефектов в зависимости от величины электронных тормозных потерь S_e в рамках моделей кулоновского взрыва и T -вспышки. Проведено срав-

нение полученных результатов в рамках двух моделей с экспериментально наблюдаемыми величинами. Показано, что модель кулоновского взрыва в силу образования более высоких температур в трековой области ($T \sim 10^3$ К, см. рис. 6) дает на три порядка более высокие значения для числа образующихся точечных дефектов в этой области по сравнению с аналогичными расчетами в рамках модели T -вспышки, которые близки к экспериментально наблюдаемым величинам [4]. На основе этого можно сделать вывод, что модель кулоновского взрыва бо-

лее адекватно описывает образование треков в металлах по сравнению с моделью T -вспышки.

ПРИЛОЖЕНИЕ

1. Константы, используемые в численных расчетах для Си и взятые из [2, 5, 6, 7]

$$N_e = 1.4 \cdot 10^5 \text{ моль/м}^3, N_i = 1.4 \cdot 10^5 \text{ моль/м}^3, \Delta H_{fus} = 13.01 \cdot 10^3 \text{ Дж/моль.}$$

$T_e, \text{ К}$	$T_e < 1.7945 \cdot 10^4 \text{ К}$	$T_e > 1.7945 \cdot 10^4 \text{ К}$
$C_e, \text{ Дж/моль} \cdot \text{К}$	$6.95 \cdot 10^{-4} T_e$	12.47 ($3R/2$)
$T_e, \text{ К}$	$10 \text{ К} < T_e < 100 \text{ К}$	$T_e > 100 \text{ К}$
$K_e, \text{ Вт/м} \cdot \text{К}$	$\frac{3.5 \cdot 10^6}{T_e T_i}$	$3.5 \cdot 10^2 \frac{T_e}{T_i}$
$T_i, \text{ К}$	$10 \text{ К} < T_i < 80 \text{ К}$	$T_i > 80 \text{ К}$
$C_i, \text{ Дж/моль} \cdot \text{К}$	$4.74 \cdot 10^{-5} T_i^3$	25 ($3R$)
$K_i, \text{ Вт/м} \cdot \text{К}$	$\frac{1.8 \cdot 10^4}{T_i}$	$\frac{1.8 \cdot 10^4}{T_i}$

Предполагается, что $10 \text{ К} < T_i < 1357.65 \text{ К}$.

2. Константы, используемые в расчетах для аморфного металлического сплава Fe₃₅B₁₅ и взятые из [1, 8]

$$\rho_{sol} = 7.5 \text{ г/см}^3, \rho_{liq} = 7.3 \text{ г/см}^3, N_i = 8.47 \cdot 10^{22} \text{ см}^{-3}, N_e = 1.73 \cdot 10^{23} \text{ см}^{-3}, \zeta = 8.97 \cdot 10^{-5} \text{ Дж/см}^3 \cdot \text{К}^2, T_{fus} = 1220 \text{ К}, T_0 = 44 \cdot 10^3 \text{ К}, D_{e min} = 8 \text{ см}^2/\text{с}, H_{fus} = 1410 \text{ Дж/см}^3, T_L = 5625 \text{ К}, k_1 = 135 \cdot 10^5 \text{ см}^2 \cdot \text{К}^2/\text{с}, k_2 = 45 \cdot 10^3 \text{ см}^2 \cdot \text{К}/\text{с},$$

$$C_i [\text{Дж/г} \cdot \text{К}] = \begin{cases} 0.67 + 1.1 \cdot 10^{-4} T_i - \frac{4.6}{\sqrt{T_i}}, & \text{тв. фаза} \\ 0.95, & \text{жидк. фаза} \end{cases}, K_i [\text{Вт/см} \cdot \text{К}] = \begin{cases} 0.021, & \text{тв. фаза} \\ 0.83, & \text{жидк. фаза} \end{cases}$$

T_e	0–300 К	300 К– T_L	T_L – T_0	$> T_0$
$C_e, \text{ Дж/см}^3 \cdot \text{К}$	ζT_e	ζT_e	ζT_e	$\frac{3}{2} N_e k_B$
$K_e, \text{ Вт/см} \cdot \text{К}$	$\zeta \frac{k_1}{T_e}$	ζk_2	$\zeta D_{e min} T_e$	$\frac{3}{2} N_e k_B D_{e min}$

ЛИТЕРАТУРА

1. C. Dufour, *Commissariat L'énergie atomique, Service de documentation et D'édition multimédia*, France, CEA-R-5638.
2. K. Yasui, *Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B* **90**, 409 (1994).
3. Е. В. Метелкин, А. И. Рязанов, *ЖЭТФ* **117**, 420 (2000).
4. A. Iwase, T. Iwata, and T. Nihira, *J. Phys. Soc. Jpn.* **61**, 3878 (1992).
5. Дж. Займан, *Электроны и фононы*, Наука, Москва (1960).
6. Y. S. Touloukian and E. H. Yco, *Specific Heat (Thermophysical Properties of Matter, Vol. 4)*, IFI, Plenum, New York, Washington (1970).
7. Y. S. Touloukian, R. W. Powell, C. Y. Ho, and P. G. Klemens, *Thermal Conductivity (Thermophysical Properties of Matter, Vol. 1)*, IFI, Plenum, New York, Washington (1970).
8. M. Toulemonde and C. Dufour, *Phys. Rev.* **46**, 14362 (1992).
9. Ю. В. Мартыненко, Ю. Н. Явлинский, *ДАН СССР* **270**, 88 (1983).
10. И. М. Лифшиц, М. И. Каганов, Л. В. Танатаров, *ЖЭТФ* **31**, 232 (1957).