

P17-2003-30

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

Направлено в журнал «Теоретическая и математическая физика»

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Экспериментальные исследования образования треков в различных материалах при воздействии на них тяжелых заряженных частиц, таких как осколки деления [1–3] и ускоренные тяжелые ионы высоких энергий (с энергиями более 1 МэВ/а.е.м.), проводятся в течение ряда последних десятилетий со все возрастающим интересом [4–12]. Это связано с тем, что радиационная физика конденсированных сред бурно развивается на имеющихся и вновь создаваемых ускорителях тяжелых ионов в ряде научных центров.

Отметим также эксперименты [13–15] по изучению воздействия мощных лазерных импульсов малой длительности (вплоть до предельно коротких импульсов лазера порядка  $10^{-12}$  с) на структуру металлов и теоретические работы, посвященные объяснению наблюдаемых эффектов [16–17].

Интерес к изучению таких процессов обусловлен особенностями радиационных изменений в материалах, которые имеют не только большое фундаментальное значение для понимания основных закономерностей взаимодействия тяжелых заряженных частиц с конденсированными средами, но также важны для прикладных целей, а именно для использования данных эффектов в развитии новых технологий и совершенствовании уже имеющихся.

Основными механизмами, объясняющими процессы образования треков тяжелых ионов в диэлектрических материалах, являются модели кулоновского взрыва и термического пика [18, 19]. Помимо этого, модель термического пика была эффективно использована для объяснения процессов неупругого распыления мелкодисперсных материалов [2–3, 20–21].

Отметим, что треком тяжелой заряженной частицы принято называть сильно деструктурированную область вблизи траектории тяжелой частицы в материале, созданную за счет температурных эффектов, вызванных ионизационными потерями энергии тяжелой заряженной частицы ( $S_{\text{inel}}=(dE/dz)_{\text{inel}}$ ), 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 расходуется на упругие взаимодействия  $S_{el}(z)=-(dE/dz)_{el}$ , 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 ( $\tau_{th}$ ) примерно на порядок меньше времени охлаждения электронов вследствие электронной теплопроводности, то есть  $\tau_{th} \ll \tau_{\chi} = r_0^2 / \chi_e$ , где  $\chi_e$  – теплопроводность электронного газа [22]. 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 [22].

С учетом аксиальной симметрии неупругих потерь энергии тяжелого иона высокой энергии  $S_{inel}(z) = -(\partial E / \partial z)_{inel}(z)$  система уравнений для определения решеточной и электронной температур в цилиндрической системе координат может быть записана в виде, полученном в основополагающих работах [23–27] и использованном в расчетах в более поздних работах (см., например, [4–5, 11–12, 29])

$$C_e(T_e) \cdot [\partial T_e / \partial t] = 1/r \cdot \partial [r \cdot \chi_e(T_e) \cdot \partial T_e / \partial r] / \partial r + \partial [\chi_e(T_e) \cdot \partial T_e / \partial z] / \partial z - g \cdot [T_e - T] + A(r,z,t), \tag{1}$$

$$C(T) \cdot [\partial T / \partial t] = 1/r \cdot \partial [r \cdot \chi^\parallel(T) \cdot (\partial T / \partial r)] / \partial r + \partial [\chi^\perp(T) \cdot \partial T / \partial z] / \partial z + g \cdot [T_e - T]. \tag{2}$$

Здесь ось  $z$  направлена перпендикулярно плоскости мишени, то есть 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  $\chi_e(T_e)$ ,  $\chi^{\parallel,\perp}(T)$  – 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 направления: 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 [30]

$$A(r, z, t) = b \cdot S_{\text{inel}0} \cdot \exp[-(t-t_0)^2 / (2 \cdot \sigma_t^2)] \cdot \exp[-r/r_0] \cdot \mu(z), \quad (3)$$

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 для  $E/A > 1$  МэВ/а.е.м.) или функции Линдхарда–Фирсова (при  $E/A \leq 1$  МэВ/а.е.м.):

$$\mu(z) \equiv S_{\text{inel}}(z) / S_{\text{inel}0}, \quad S_{\text{inel}0} \equiv S_{\text{inel}}(z=0), \quad (4)$$

где  $E$  (МэВ) – энергия иона, а  $A$  (а.е.м.) – его масса. Время достижения электронами равновесного распределения (то есть время свободного пробега  $\delta$ -электронов со средней энергией  $\varepsilon_e$ ),  $t_0 \approx (1-5) \times 10^{-15}$  с, полуширина распределения по  $t$  принята равной  $\sigma_t = t_0$  [31]. Скорость экспоненциального спада [32] или пространственная ширина высоковозбужденной области [33]  $r_0 \leq 2,5$  нм (согласно данным работы [32]) и  $r_0 \approx 1$  нм (см. [22]). Нормировочный множитель (НМ)  $b$  определяется из условий нормировки:

$$\int_0^{\infty} dt \int_0^{r_m} 2 \cdot \pi r \cdot A(r, z, t) \cdot dr = S_{\text{inel}} \equiv -(\partial E / \partial z)_{\text{inel}}(z); \quad (5)$$

здесь  $r_m$  – максимальный пробег  $\delta$ -электронов, зависящий от максимальной энергии  $\varepsilon_m$ , передаваемой отдельному электрону [22, 33]. Откуда после интегрирования имеем для НМ выражение

$$b = \{(2 \cdot \pi)^{3/2} \cdot 0,84134 \cdot r_0^2 \cdot t_0 \cdot [1 - \exp(-r_m/r_0) \cdot (1 + r_m/r_0)]\}^{-1}, \quad (6.1)$$

то есть при  $r_m/r_0 \gg 1$  для НМ имеем

$$b = \{(2 \cdot \pi)^{3/2} \cdot 0,84134 \cdot r_0^2 \cdot t_0\}^{-1}. \quad (6.2)$$

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]):

$$T(r, z, t=0) = T_0 \text{ и } T_e(r, z, t=0) = T_0, \quad (7.1)$$

а граничные условия запишем как

$$\partial T_e(r, z, t) / \partial r|_{r \rightarrow r_{\min}} = 0 \text{ и } \partial T(r=0, z, t) / \partial r|_{r \rightarrow r_{\min}} = 0, \quad (7.2)$$

$$T(r=R_{\max}, z, t) = T_0 \text{ и } T_e(r=R_{\max}, z, t) = T_0, \quad (7.3)$$

$$T(r, z=Z_{\max}, t) = T_0 \text{ и } T_e(r, z=Z_{\max}, t) = T_0. \quad (7.4)$$

Здесь и далее  $R_{\max}$  – минимальный радиус удаления от траектории иона, а  $Z_{\max}$  – минимальная глубина, превышающая длину проективного пробега иона, при которой 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  $r = R_{S-M}(t)$ , то есть при  $0 \leq r < R(t)$

образуется расплавленная область, а при  $R_{S-M}(t) < r < R_{\max}$  – твердая фаза. Тогда для температуры решетки в обеих областях имеем:

$$C_M(T_1) \cdot [\partial T_1 / \partial t] = 1/r \cdot \partial [r \cdot \chi_M(T_1) \cdot (\partial T_1 / \partial r)] / \partial r + \\ + \partial [\chi_M(T_1) \cdot \partial T_1 / \partial z] / \partial z + g \cdot [T_e - T_1], \text{ при } 0 \leq r < R_{M-S}(t); \quad (8.1)$$

$$C_S(T_2) \cdot [\partial T_2 / \partial t] = 1/r \cdot \partial [r \cdot \chi_S^{\parallel}(T_2) \cdot (\partial T_2 / \partial r)] / \partial r + \\ + \partial [\chi_S^{\perp}(T_2) \cdot \partial T_2 / \partial z] / \partial z + g \cdot [T_e - T_2], \text{ при } R_{M-S}(t) \leq r < R_{\max}. \quad (8.2)$$

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

$$T_1(r, z, t=0) = T_0, \quad T_2(r=R_{\max}, z, t) = T_0, \quad T_2(r, z=Z_{\max}, t) = T_0, \quad (9.1)$$

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

$$T_1(r=R_{S-M}-0, z, t) = T_{\text{melt}}(P), \quad T_2(r=R_{S-M}+0, z, t) = T_{\text{melt}}(P), \quad (9.2)$$

$$\chi_S^{\parallel}(T_1) \cdot \partial T_1 / \partial r (r=R_{S-M}+0, z, t) - \chi_M(T_2) \cdot \partial T_2 / \partial r (r=R_{S-M}-0, z, t) = \\ = \lambda_{S-M} \cdot \rho_S \cdot \partial R_{S-M} / \partial t, \quad (9.2')$$

$$T_1(r, z=Z_{S-M}-0, t) = T_{\text{melt}}(P), \quad T_2(r, z=Z_{S-M}+0, t) = T_{\text{melt}}(P), \quad (9.3)$$

$$\chi_S^{\perp}(T_1) \cdot \partial T_1 / \partial z (r, z=Z_{S-M}+0, t) - \chi_M(T_2) \cdot \partial T_2 / \partial z (r, z=Z_{S-M}-0, t) = \\ = \lambda_{S-M} \cdot \rho_S \cdot \partial Z_{S-M} / \partial t, \quad (9.3')$$

где  $\rho_S$  – 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  $z=Z_{M-V}(t)$ :

$$T_2(r=R_{M-V}+0, z, t) = T_{\text{boil}}(P), \quad T_2(r, z=Z_{M-V}+0, t) = T_{\text{boil}}(P), \quad (9.4)$$

$$-\chi_M(T_2) \cdot \partial T_2 / \partial r (r=R_{M-V}+0, z, t) = \lambda_{M-V} \cdot \rho_M \cdot \partial R_{M-V} / \partial t, \quad (9.4')$$

$$-\chi_M(T_2) \cdot \partial T_2 / \partial z(r, z=Z_{M-V}+0, t) = \lambda_{M-V} \cdot \rho_M \cdot \partial Z_{M-V} / \partial t, \quad (9.5)$$

то есть считаем, что имеется подвижная граница в форме полого конуса с координатами  $r=R_{M-V}(t)$  и  $Z=Z_{M-V}(t)$  [16], со стенок которого может происходить испарение атомов решетки, а при  $R_{M-V}(t) \leq r < R_{S-M}$  и  $Z_{M-V}(t) < z < Z_{S-M}$  – жидкая фаза ( $M$ ). Здесь и далее  $T_{\text{melt}}$  и  $T_{\text{boil}}$  – температуры плавления и кипения-испарения материала, а  $\rho_M$  – плотность жидкой фазы. Фактически граничные условия (9.4)–(9.5) означают, что процесс испарения материала (атомов решетки) происходит со стенок диска с высотой  $Z_{M-V}$  и радиусом  $R_{M-V}$ .

Здесь  $\lambda_{S-M}$  – удельная (скрытая) теплота плавления (Дж/кг),  $\rho$  – плотность материала решетки,  $\chi^{\perp, \parallel}_S(T)$  и  $\chi_M(T)$  – удельные теплопроводности твердой фазы и жидкой фазы соответственно, а  $\lambda_{M-V}$  – удельная теплота парообразования (Дж/кг).

Ввиду того, что с поверхности облучаемого образца (на месте входа тяжелого иона высокой энергии, то есть при  $z=0$ ) будет происходить излучение тепла с “торца” цилиндрической области трека по закону Стефана–Больцмана, то для функции  $T(r, z, t)$  следует записать нелинейное граничное условие

$$\chi^{\perp}(T) \cdot \partial T / \partial z(r, z=0, t) = a \cdot \sigma_{S-B} \cdot [T(r, z=Z_{M-V}=0, t)^4 - T_{10}^4]. \quad (10)$$

Правую часть из выражения (10) следует добавить в правые части выражений (9.3'), (9.5), где  $T_{10}$  – температура среды, находящейся в тепловом равновесии с исследуемой облучаемой поверхностью;  $a$  – поглощательная способность твердого тела,  $a < 1$ ; здесь  $\sigma_{S-B} = 5,6687 \cdot 10^{-8}$  Вт/(м<sup>2</sup>·К<sup>4</sup>). Оценим вклад члена в правой части выражения (10) в процессы перераспределения тепла при значениях входящих в него параметров при  $T=2000$  К для области излучения с



диаметром трека  $D_{\text{т}}=10^{-8}$  м,  $\Delta S=\pi D_{\text{т}}^2/4=0,785\cdot 10^{-16}$  м<sup>2</sup>,  $\Delta E/\Delta t=\sigma_{\text{С-В}}\cdot T^4\cdot \Delta S=$   
 $=7,1\cdot 10^{-11}$  Вт= $4,4\cdot 10^8$  эВ/с. Это значение является относительно малым, и  
 при вычислениях температуры решетки в треке излучением по закону  
 Стефана–Больцмана можно пренебречь. Учет этого излучения становится  
 заметным при гипотетических температурах в треке порядка  $10^5$  К; тогда  
 $\Delta E/\Delta t\approx 4,45\cdot 10^{-4}$  Вт= $2,78\cdot 10^{15}$  эВ/с.

Число атомов решетки, которые будут испаряться из перегретой зоны,  
 подвижные границы стенок которой имеют координаты  $r=R_{\text{М-В}}(t)$  и  
 $Z=Z_{\text{М-В}}(t)$ , в единицу времени с единицы площади задается  
 соотношениями

$$\begin{aligned} \partial n_r/\partial t(r=R_{\text{М-В}}, z, t) &= \rho_{\text{М}}(\partial R_{\text{М-В}}/\partial t)/M_i \approx \\ &\approx (\partial M_r/\partial t)/(2\cdot \pi R_{\text{М-В}}\cdot Z_{\text{М-В}})/M_i, \end{aligned} \quad (11.1)$$

$$\partial n_z/\partial t(r, z=Z_{\text{М-В}}, t) = \rho_{\text{М}}(\partial Z_{\text{М-В}}/\partial t)/M_i \approx (\partial M_z/\partial t)/[\pi(R_{\text{М-В}})^2]/M_i, \quad (11.2)$$

где  $\partial M_r/\partial t$  и  $\partial M_z/\partial t$  – масса атомов решетки, испаренная с единицы  
 площади боковой поверхности цилиндра радиусом  $r=R_{\text{М-В}}(t)$  и глубиной  
 $Z_{\text{М-В}}(t)$  и со дна цилиндра при  $Z=Z_{\text{М-В}}(t)$  в единицу времени,  $M_i$  – масса  
 атома решетки (кг), а  $\rho_{\text{М}}$  – плотность материала в жидкой фазе.

В работе [46] приведено выражение для числа атомов, испаренных с  
 поверхности твердого тела, в зависимости от температуры поверхности в  
 следующем виде

$$dn/dt = \nu 3,5\cdot 10^{22}\cdot P(T)/\{M_i\cdot T\}^{1/2}, \text{ атом}/(\text{см}^2\cdot \text{с}), \quad (12)$$

где  $\nu$  – вероятность прилипания атома металла к поверхности (sticking  
 probability),  $P(T)$  – равновесное давление пара (Торр) при температуре  
 $T$  (К),  $M_i$  – атомный вес атома решетки. Обычно [46]  $\nu \approx 0,6-0,9$ , но далее  
 при вычислениях полагается равной единице, хотя это и не

принципиально. Равновесное давление паров для металлов хорошо известно [47] и может быть записано как

$$P(T)=P_0 \cdot \exp[-\Delta H/(k_B \cdot T)], \quad (13)$$

где  $\Delta H$  – теплота сублимации, слабо зависящая от температуры [46, 47].

В работе [52] развита модель для распыления на основе вспышки упругих столкновений (elastic-collision spike), которая далее называется стандартной теорией температурной вспышки [53]. Выражение для скорости испарения атомов с поверхности, введенное в работе [52], использовано для объяснения экспериментальных результатов в области высоких ионизационных потерь энергии в [54]:

$$dn/dt(r,t)=N \cdot [k_B \cdot T(r,t)/(2 \cdot \pi M_i)]^{1/2} \cdot \exp[-U_0/(k_B \cdot T(r,t))]. \quad (14)$$

Здесь  $N$  – плотность атомов в жидкой фазе;  $U_0$  – энергия связи атомов на поверхности жидкости, которая может быть оценена как  $\sim 1$  эВ [54, 55]. Тогда должно выполняться условие (см. (11.2))

$$Z_{M,v}(t)=\int_0^t dn/dt(r,t^*) \cdot dt^*/N. \quad (15)$$

Сравнение результатов, полученных с использованием выражений (11)–(15), позволяет проверить применимость этих подходов для оценки количества испаренных атомов.

При использовании системы связанных уравнений (1), (2) следует учитывать следующее положения. При торможении быстрой тяжелой заряженной частицы в конденсированных средах такая частица теряет свою энергию на возбуждение и ионизацию электронов. Удельные неупругие потери энергии ускоренного иона ( $S_{inel}=-\partial E/\partial z_{inel}$ ) составляют десятки кэВ/нм, а плотности возбужденных электронов в цилиндрической области с диаметром 100 Å могут быть порядка  $10^{20}$  см<sup>-3</sup> и выше.

Процессы релаксации энергии возбужденных электронов следующие: электрон-электронное рассеяние (время релаксации порядка  $10^{-15}$ – $10^{-13}$  с), электрон-решеточная релаксация (время релаксации порядка  $10^{-13}$ – $10^{-12}$  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, то есть при временах порядка  $10^{-12}$  с.

А для времен, меньших  $10^{-12}$  с, возможно, следует использовать иную температурную модель, учитывающую волновой характер переноса тепловой энергии (см., например, [36, 37, 50]). 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 (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 нм, а область изменения по глубине – до нескольких десятков мкм (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 (1) и (2) по координатам  $r$  и  $z$  могут быть существенно различными.

## 2.1. ПАРАМЕТРЫ МОДЕЛИ

Параметры для решетки твердого тела, входящие в систему уравнений (1), (2), можно в общем виде представить (см., например, [3–6]), как

$$C(T) = \sum_{i=0}^{i=4} C_i \times T^i, \quad (16.1)$$

$$\chi^{\parallel, \perp}(T) = \sum_{i=0}^{i=4} \chi^{\parallel, \perp}_i \times T^i. \quad (16.2)$$

Заметим, что количество членов в выражениях (16.1) и (16.2) определяется температурными интервалами, где рассматриваются значения удельной теплоемкости  $C(T)$  в Дж/(м<sup>3</sup>·К) и удельной теплопроводности  $\chi^{\parallel, \perp}(T)$  в Вт/(м·К). Значения для коэффициентов разложения  $C_i$  и  $\chi^{\parallel, \perp}_i$  по температуре решетки при  $i=1,2,3,4$  также представлены в [4, 5].

Удельная электронная теплоемкость  $C_e(T_e)$  в теории свободного электронного газа представляется в виде линейной функции по температуре [4]

$$C_e(T_e) = \gamma T_e = [\pi^2 \cdot k_B^2 \cdot n_e / (2 \cdot E_F)] \cdot T_e, \quad \text{при } T_e \leq T_F = E_F / k_B, \quad (17.1)$$

$$C_e(T_e) = \text{const} = 3/2 \cdot k_B \cdot n_e, \quad T_e > T_F, \quad (17.2)$$

где энергия Ферми имеет вид  $E_F = [h^2 / (8\pi^2 \cdot m_e) \cdot (3 \cdot \pi^2 \cdot n_e)^{2/3}]$ , здесь  $m_e$  и  $n_e$  – масса электрона и плотность электронов в см<sup>3</sup>, а  $k_B$  и  $h$  – постоянные Больцмана и Планка.

Зависимость удельной теплопроводности электронного газа  $\chi_e(T_e)$  была обсуждена в работе [5] и может быть выражена через коэффициент диффузии электронов  $D_e(T_e)$ :

$$\chi_e(T_e) = C_e(T_e) \cdot D_e(T_e). \quad (18)$$

Температурная зависимость  $D_e(T_e)$  была рассмотрена в работе [39].

Функция  $\chi_e(T_e)$  имеет минимум при  $T_e \approx T_F$ , (см., например, [22, 39]):

$$\chi_e(T_e) = \gamma T_e^{3/2}, \quad T_e \geq T_F, \quad (19.1)$$

$$\chi_e(T_e) \sim 1/T_e^2, \quad T_e < T_F, \quad (19.2)$$

для железа  $\gamma = 0,033 \text{ см}^2/(\text{с} \cdot \text{эВ}^{3/2})$ . В работах [4, 5] для  $D_e(T_e)$  для ряда металлов были приняты значения  $D_e(300 \text{ К}) = 1,5 \cdot 10^{-2} \text{ м}^2/\text{с}$  и  $D_{\min}(T_e \approx T_F) = 4 \cdot 10^{-4} \text{ м}^2/\text{с}$ .

Константа электрон-фононного взаимодействия  $g$ , если температура решетки не намного меньше температуры Дебая ( $T \leq T_D$ ), может быть представлена как

$$g = \pi^2 \cdot m_e \cdot n_e \cdot V_S^2 / [6 \cdot \tau_e(T_e) \cdot T_e], \quad T_e \gg T_D, \quad (20.1)$$

где  $\tau_e(T_e)$  – среднее время между двумя столкновениями электрона, то есть  $\tau_e(T_e) = \lambda / v_e$ ; здесь  $\lambda$  – длина свободного пробега электрона со скоростью  $v_e$ ;  $V_S$  – скорость звука в металле,  $V_S = k_B \cdot T_D / [2 \cdot \pi \cdot \hbar \cdot (6 \cdot \pi^2 \cdot n_a)^{1/3}]$ ,  $n_a$  – плотность атомов решетки в  $\text{см}^3$ . Используя соотношение между  $\tau_e(T_e)$  и электропроводностью  $\sigma_e(T_e)$  [4, 5], находим также

$$g = \pi^4 \cdot (k_B \cdot n_e \cdot V_S)^2 / [18 \cdot L \cdot \sigma_e(T_e) \cdot T_e], \quad T_e > T_D. \quad (20.2)$$

Здесь  $L = \pi^2 / 3 \cdot (k_B / e_0)^2$  – число Лоренца,  $e_0$  – заряд электрона.

Кроме того, используя закон Видемана–Франца, имеем [4]

$$g = \pi^4 \cdot (k_B \cdot n_e \cdot V_S)^2 / [18 \cdot \chi_e(T_e)]. \quad (20.3)$$

Как и в работе [5], константа электрон-фононного взаимодействия  $g$  также должна изменяться при изменении температуры  $T$ , если использовать измеренные значения электропроводности металлов  $\sigma$ . Это означает, что в вычислениях величины  $g$  (см. (9.3)) предполагается, что  $K_e(T_e) = K(T)$ .

В заключение данного раздела приведем выражения для теплопроводностей жидкостей. Как показано в обзоре [51], 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  $L = \chi / [\sigma T] = 2,44 \cdot \text{Вт} \cdot \text{Ом} / \text{К}^2$ . В предположении, что функция Лоренца одинакова для жидкой ( $M$ ) и твердой ( $S$ ) фаз, можно написать [51]

$$\chi_S / \chi_M = (v_S / v_M)^2 = \exp(0,08 \cdot \lambda_{S-M} / T_{\text{melt}}), \quad (21.1)$$

здесь  $\lambda_{S-M} = \lambda_{S-M} / M_i$  - скрытая теплота плавления (кДж/моль),  $M_i$  - масса атома решетки (кг). По результатам, приведенным в справочнике [42], теплопроводность жидкостей при температуре  $T = 0^\circ\text{C}$  и атмосферном давлении может быть рассчитана по полуэмпирической формуле

$$\chi_M = 9 \cdot 10^{-3} \cdot N^{-1/4} \cdot (T_{\text{boil}} \cdot \rho_M)^{1/2} \cdot C_P, \quad (21.2)$$

где точность вычислений составляет  $\pm 10\%$ . При высоких давлениях, достигающих  $1,2 \cdot 10^9$  Па, также можно написать [42]

$$\chi_M(T, P) = \chi_M(P=0 \text{ Па}) \cdot \{1 + (T_{\text{boil}} \cdot \rho_M)^{-1/2} \cdot [P / (1,44 \cdot 10^7)]^{2/3}\}, \quad (21.3)$$

где  $\rho_M$  – плотность при  $P=0$  Па,  $P$  – избыточное давление.

### 2.1.1. ЗАВИСИМОСТЬ ПАРАМЕТРОВ МОДЕЛИ ОТ ДАВЛЕНИЯ

Как известно [42], уравнение состояния твердого тела записывается в виде уравнения Ми–Грюнайзена

$$P \cdot V = P_0 \cdot V + 2 \cdot \gamma E, \quad (22)$$

где  $\gamma = \alpha(T) \cdot V / (k_T \cdot C_V)$  – постоянная Грюнайзена,  $\alpha(T)$  – температурный коэффициент объемного расширения ( $K^{-1}$ );  $k_T = -1/V \cdot (dV/dP)_T = \alpha \cdot V / (\gamma C_V)$  – изотермическая сжимаемость ( $\text{Па}^{-1}$ ),  $P_0$  – давление при  $T=0$  К,  $E$  – тепловая энергия кристаллической решетки:  $E \approx 3/2 \cdot R \cdot T$ ,  $R$  – газовая постоянная. Выражение для  $P_0$  имеет вид

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

где  $r = (V/V_0)^{1/3}$ ,  $A$ ,  $b$ ,  $K$  – постоянные; параметр  $m=4$  для молекулярных кристаллов и  $m=9$  для ионных, щелочных и других металлов с сильным перекрытием электронных оболочек.

Учитывая, что  $C_V = 3 \cdot R \cdot n \cdot D(T_D/T)$ ,  $n$  – число атомов в молекуле, а  $D(T_D/T)$  – функция Дебая, причем  $D(T_D/T) \approx 1$  при  $T > T_D$  ( $T_D$  – температура Дебая), находим (см. также работы [40, 41]), что выражение, связывающее изменение температуры  $\Delta T \equiv T - T_0$ , 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

$$\Delta P \cong \alpha(T) \cdot \Delta T / k_T. \quad (23)$$

Соотношение, связывающее удельные теплоемкости при постоянном объеме  $C_V$  и постоянном давлении  $C_P$  (Дж/(м<sup>3</sup>·К)), записывается как

$$C_V = C_P - [\alpha(T)]^2 \cdot T / k_T. \quad (24)$$

Оценим вклад в удельную теплоемкость при температуре  $T=1500$  К за счет второго слагаемого в (24), например, для никеля. Имеем

$$C_P^{\text{Ni}}(1500 \text{ К}) = 616 \text{ Дж}/(\text{кг} \cdot \text{К}), \rho^{\text{Ni}} = 5,49 \cdot 10^6 \text{ Дж}/(\text{м}^3 \cdot \text{К}),$$

$$\alpha^{\text{Ni}}(1200 \text{ К}) = 6,09 \cdot 10^{-5} \text{ К}^{-1},$$

$$k_T = 5,5475 \cdot 10^{-12} \text{ Па}^{-1},$$

где  $\rho^{\text{Ni}} = 8,91 \cdot 10^3 \text{ кг}/\text{м}^3$  – плотность. Тогда находим, что вычисленное значение удельной теплоемкости равно  $C_V = 4,49 \cdot 10^3 \text{ кДж}/(\text{м}^3 \cdot \text{К})$ , то есть на 22,3% меньше, чем без учета изменения удельной теплоемкости от давления. Столь большое изменение  $C_V$  должно привести к понижению температуры решетки в треке тяжелого иона, как будет показано ниже в приближенных оценках.

Заметим, что температуры плавления  $T_{\text{melt}}$ , кипения  $T_{\text{boil}}$  и сублимации  $T_{\text{subl}}$  также зависят от давления, а именно с ростом давления значения  $T_{\text{boil}}$  и  $T_{\text{subl}}$  возрастают, а  $T_{\text{melt}}$ , как правило, тоже возрастает [42]. Процессы плавления, кипения и сублимации зависят от давления в соответствии с уравнением Клапейрона–Клаузиуса

$$dT/dP = T \cdot (\Delta V / \Delta H), \quad (25)$$

где  $T$ ,  $\Delta H$  – температура и теплота перехода,  $\Delta V$  – изменение объема вещества при переходе. Зависимости  $T_{\text{boil}}(P)$  и  $T_{\text{subl}}(P)$  называются кривой упругости пара ([42], гл.11). Тогда имеем:



$$T_{\text{melt}}(P)=273+\Delta P \cdot [dT_{\text{melt}}/dP], \text{ К.} \quad (26)$$

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

Значения температуры  $T_{\text{boil}}(P)$  и  $T_{\text{subl}}(P)$ , при которой достигается давление насыщенного пара  $P$  для неорганических соединений, можно найти в справочнике [42], как полученные из соотношения  $T_{\text{boil}}(P)=A/(B-P)$ , где  $A$  и  $B$  – постоянные.

## 2.2. ДЛИНА СВОБОДНОГО ПРОБЕГА ВОЗБУЖДЕННЫХ ЭЛЕКТРОНОВ

Как известно, возбуждение электронной подсистемы происходит в результате прохождения ускоренного тяжелого иона через твердое тело. В зависимости от энергии иона более 90% его энергетических потерь идет на ионизацию. Так как времена электрон-электронных соударений много меньше времен электрон-фононного взаимодействия, то образуется сильно неравновесная электронная подсистема. Ясно также, что атом мишени ионизируется, если энергия, переданная электрону атома  $E_{\text{inel}}$ , превышает его энергию связи  $E_b$  ( $E_{\text{inel}} > E_b$ ). Детальный расчет величины переданной энергии с учетом орбитального движения электронов приведен в работе [34]. Как показано в [22], для оценки длины свободного пробега в металлах  $\lambda(E)$ , где  $E=E_{\text{inel}}-E_b$  – кинетическая энергия электрона, можно использовать значения глубины выхода электронов при оже-спектроскопии. Тогда имеем (см. [22])

$$\lambda(E)=\alpha_1/E^2+\alpha_2 \cdot E^{1/2}, \quad (27)$$

где константы равны  $\alpha_1=3,0 \cdot 10^3 \text{ \AA} \cdot \text{эВ}^2$ ,  $\alpha_2=0,4 \text{ \AA} \cdot \text{эВ}^{-1/2}$ .

Первичные возбужденные электроны, образовавшиеся в процессе ионизации атомов, удаляются от его траектории на расстояние, определяемое выражением

$$r_0 = \lambda(E) \cdot \sin(\phi) = \lambda(E) \cdot [1 - (E/E_m)]^{1/2}, \quad (28)$$

где  $\phi$  – угол между векторами скорости ионизованного электрона и налетающего тяжелого иона (угол рассеяния);  $E_m = 4 \cdot E_i \cdot m_e \cdot M_i / (m_e + M_i)^2$ , где  $m_e$ ,  $M_i$  и  $E_i$  – массы электрона и иона и энергия иона соответственно [22].

В результате электрон-электронных столкновений электроны образуют максвелловское распределение, то есть приобретают электронную температуру  $T_e$  в течение времени термализации  $t_{eq}$ . Это время определяется [22] как время уменьшения энергии электрона  $E$  от средней энергии в спектре первичных возбужденных электронов  $\bar{E} = E_m/2$  до средней тепловой энергии  $3/2T_0$  в цилиндрической области возбужденных электронов. Время термализации  $t_{eq}$  по оценкам в работе [22] получилось равным  $t_{eq} \approx 3,0 \cdot 10^{-16}$  с, а радиус области возбужденных электронов

$$r_0 = 2/3^{1/2} \cdot \lambda, \quad (29)$$

следовательно,  $r_0 \leq 10 \text{ \AA}$ .

Таким образом, функция  $r_0(E)$ , как и функция  $\lambda(E)$ , уменьшается при малых значениях энергии как  $E^{-2}$ , затем достигает минимума  $\lambda_{\min}(E_1) \approx r_0(E_1) = 3,9 \text{ \AA}$  при  $E_1 = (4 \cdot \alpha_1 / \alpha_2)^{2/5} = 61,78 \text{ эВ}$ , а далее растет медленнее, чем  $\lambda(E)$ , и обращается в нуль при  $E = E_m$ .

Заметим, что в общем случае на длину свободного пробега возбужденного электрона также оказывают влияние статические дефекты решетки: а) рассеяние точечными дефектами (примесями, вакансиями и междоузельными атомами); б) рассеяние протяженными дефектами –

дислокациями (краевыми и винтовыми) и скоплениями вакансий, образующимися как при воздействии ускоренных заряженных частиц, так и при пластической деформации; в) рассеяние двумерными дефектами (дефектами упаковки и границами между кристаллитами [35]). Время релаксации, обусловленное статическими дефектами, может быть представлено в виде

$$\tau_r = 1/N_r \cdot v_e \cdot \sigma_e, \quad (30)$$

где  $N_r$  – концентрация точечных дефектов,  $v_e$  – скорость рассеиваемого электрона,  $\sigma_e$  – сечение рассеяния. Тогда ясно, что длина свободного пробега будет выражаться как

$$\lambda = 1/[N_r \cdot \sigma_e]. \quad (31)$$

Можно сделать вывод, что накопление дефектов радиационного происхождения (точечных дефектов, их скоплений) при облучении тяжелыми заряженными частицами, пластическая деформация кристаллов, наличие высокой исходной концентрации дефектов и межкристаллитных границ должны приводить к уменьшению длины свободного пробега возбужденных электронов и, следовательно, локализации энергии, выделенной прошедшей высокоионизирующей частицей в относительно небольшом объеме, то есть фактически к уменьшению величины  $r_0(E)$ .

### 3. ЧИСЛЕННЫЕ СХЕМЫ ВЫЧИСЛЕНИЙ. АЛГОРИТМЫ

При численном решении уравнений (1) и (2) целесообразно ввести безразмерные переменные, а именно:

$$C \equiv C/[C], \quad \chi \equiv \chi'/[\chi], \quad r' \equiv r/[x], \quad z' \equiv z/[x], \quad t' \equiv t \cdot \{[\chi]/([C] \cdot [x]^2)\},$$

$$g' \equiv g \cdot [x]^2 / [\chi], \quad A(r', z', t') \equiv A(r, z, t) \cdot [x]^2 / [\chi]; \quad R'_{\max} \equiv R_{\max} / [x],$$

$$Z'_{\max} \equiv Z_{\max} / [x],$$

где величины в скобках обозначают размерности соответствующих физических величин:  $[C] \equiv \text{Дж}/(\text{м}^3 \cdot \text{К})$ ,  $[\chi] \equiv \text{Вт}/(\text{м} \cdot \text{К})$ ,  $[x] \equiv \text{м}$ . Далее под величинами, входящими в уравнения, будем подразумевать их безразмерные значения, а индекс “ ’ ” опускаем.

Численное решение уравнений (1) и (2) в трехмерном случае в цилиндрических координатах будем искать, используя методы, описанные в [43–45]. Рассмотрим прямоугольную сетку по  $r$  и  $z$  с переменными шагами  $h_1$  и  $h_j$ :

$$r \in [r_{\min}, R_{\max}], \quad h_1 = r_1 - r_{1-1}, \quad I = 0, 1, \dots, N1, \quad \text{где } r_0 = r_{\min}, \quad r_{N1} = R_{\max};$$

$$z \in [0, Z_{\max}], \quad h_j = z_j - z_{j-1}, \quad J = 0, 1, \dots, N2, \quad \text{где } z_0 = 0, \quad z_{N2} = Z_{\max};$$

$$h^*_j = 0,5 \cdot [h_{j+1} + h_j]. \quad (32)$$

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

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:

$$C(T_{I,J,K}) \cdot [T_{I,J,K+1} - T_{I,J,K}] / \tau = \sigma / r_1 \cdot \{ B_{I+1/2,K+1} \cdot [T_{I+1,J,K+1} - T_{I,J,K+1}] / h_{I+1} -$$

$$- B_{I-1/2,K+1} \cdot [T_{I,J,K+1} - T_{I-1,J,K+1}] / h_1 \} / h^*_{I+1} +$$

$$+ (1 - \sigma) / r_1 \cdot \{ B_{I+1/2,K} \cdot [T_{I+1,J,K} - T_{I,J,K}] / h_{I+1} -$$

$$- B_{I-1/2,K} \cdot [T_{I,J,K} - T_{I-1,J,K}] / h_1 \} / h^*_{I+1} +$$

$$+ \sigma \cdot \{ C_{J+1/2,K+1} \cdot [T_{I,J+1,K+1} - T_{I,J,K+1}] / h_{J+1} -$$

$$- C_{J-1/2,K+1} \cdot [T_{I,J,K+1} - T_{I,J-1,K+1}] / h_j \} / h^*_{J+1} +$$

$$+ (1 - \sigma) \cdot \{ C_{J+1/2,K} \cdot [T_{I,J+1,K} - T_{I,J,K}] / h_{J+1} -$$

$$- C_{J-1/2,K} \cdot [T_{I,J,K} - T_{I,J-1,K}] / h_j \} / h^*_{J+1} +$$

$$+g(T_{I,J,K}^c) \cdot [T_{I,J,K}^c - T_{I,J,K}], \quad (33.1)$$

$$\begin{aligned} C^c(T_{I,J,K}) \cdot [T_{I,J,K+1}^c - T_{I,J,K}^c] / \tau = \sigma / r_1 \cdot \{ B_{I+1/2, K+1}^c \cdot [T_{I+1, J, K+1}^c - T_{I, J, K+1}^c] / h_{I+1} - \\ - B_{I-1/2, K+1}^c \cdot [T_{I, J, K+1}^c - T_{I-1, J, K+1}^c] / h_1 \} / h_{I+1}^* + \\ + (1 - \sigma) / r_1 \cdot \{ B_{I+1/2, K}^c \cdot [T_{I+1, J, K}^c - T_{I, J, K}^c] / h_{I+1} - \\ - B_{I-1/2, K}^c \cdot [T_{I, J, K+1}^c - T_{I-1, J, K}^c] / h_1 \} / h_{I+1}^* + \\ + \sigma \cdot \{ C_{J+1/2, K+1}^c \cdot [T_{I, J+1, K+1}^c - T_{I, J, K+1}^c] / h_{J+1} - \\ - C_{J-1/2, K+1}^c \cdot [T_{I, J, K+1}^c - T_{I, J-1, K+1}^c] / h_J \} / h_{J+1}^* + \\ + (1 - \sigma) \cdot \{ C_{J+1/2, K}^c \cdot [T_{I, J+1, K}^c - T_{I, J, K}^c] / h_{J+1} - \\ - C_{J-1/2, K}^c \cdot [T_{I, J, K+1}^c - T_{I, J-1, K}^c] / h_J \} / h_{J+1}^* - \\ - g(T_{I,J,K}^c) \cdot [T_{I,J,K}^c - T_{I,J,K}] + A_{I,J,K}. \end{aligned} \quad (33.2)$$

В выражениях (33.1) и (33.2) введены обозначения:

$$\begin{aligned} B_{I+1/2, K}^c &\equiv 0,25 \cdot [r_{I+1} + r_I] \cdot [\chi^c(T_{I+1, J, K+1}) + \chi^c(T_{I, J, K+1})], \\ C_{J+1/2, K}^c &\equiv 0,5 \cdot [\chi^c(T_{I, J+1, K}) + \chi^c(T_{I, J, K})], \\ B_{I+1/2, K} &\equiv 0,25 \cdot [r_{I+1} + r_I] \cdot [\chi^{\parallel}(T_{I+1, J, K}) + \chi^{\parallel}(T_{I, J, K})], \\ C_{J+1/2, K} &\equiv 0,5 \cdot [\chi^{\perp}(T_{I, J+1, K}) + \chi^{\perp}(T_{I, J, K})], \\ T_{I, J, K}^c &\equiv T^c(r_I, z_J, t_K) \text{ и } T_{I, J, K} \equiv T(r_I, z_J, t_K). \end{aligned} \quad (33.3)$$

Для сокращения времени вычисления при численном решении уравнений (1) и (2) можно использовать иной набор коэффициентов в (33.1)–(33.3) с заменой  $B_{I\pm 1/2, K}$  и  $C_{J\pm 1/2, K}$  на  $B_{I\pm 1, K}$  и  $C_{J\pm 1, K}$ :

$$\begin{aligned} B_{I\pm 1, K}^c &\equiv r_{I\pm 1} \cdot \chi^c(T_{I\pm 1, J, K}), \quad C_{J\pm 1, K}^c \equiv \chi^c(T_{I, J\pm 1, K}), \\ B_{I\pm 1, K} &\equiv r_{I\pm 1} \cdot \chi^{\parallel}(T_{I\pm 1, J, K}), \quad C_{J\pm 1, K} \equiv \chi^{\perp}(T_{I, J\pm 1, K}), \quad h_{I\pm 1}^* \equiv h_I \end{aligned} \quad (33.4)$$

Ясно, что для случая, обычно решаемого, с зависимостью в системе уравнений (1) и (2) только от  $r$  следует положить  $C_{J, K}$  и  $C_{J, K}^c$  равными нулю, в выражениях (33.1)–(33.4).

Заметим, что приведенная в выражениях (33.1) и (33.2) схема устойчива при условии (для сетки с постоянными шагами  $h_1$  и  $h_2$  по координатам  $r$  и  $z$ )

$$\sigma \geq \sigma_0, \quad \sigma_0 = 0,5 - 1/\{\tau[4/h_1^2 + 4/h_2^2]\}. \quad (34)$$

Следовательно, на квадратной сетке  $h_1 = h_2 = h$  условие устойчивости будет иметь вид  $\tau < h^2/4$  (в одномерном случае при отсутствии производной по  $z$  условие устойчивости будет  $\tau < h^2/2$ ). Поэтому схемы с  $\sigma \geq 1/2$ , в том числе и неявная ( $\sigma = 1$ ) и симметричная ( $\sigma = 1/2$ ), безусловно устойчивы, а скорости сходимости при безусловной устойчивости будут  $O(\tau + h^2)$  при  $\sigma \geq 1/2$  и  $O(\tau^2 + h^2)$  при  $\sigma = 1/2$ .

Начальные условия в разностной форме представимы в виде

$$T_{I,J,K=0} = T_0, \quad T_{I,J,K=0}^c = T_0 \quad \text{при } I=0,1,\dots,N1 \text{ и } J=0,1,\dots,N2, \quad (35.1)$$

а граничные условия в разностной форме можно записать как

$$\begin{aligned} [T_{I=1,J,K} - T_{I=0,J,K}]/r_1 &= 0, & [T_{I=1,J,K}^c - T_{I=0,J,K}^c]/r_1 &= 0, \\ T_{N1,J,K} &= T_0, & T_{N1,J,K}^c &= T_0 \quad \text{при } K=0,1,\dots,K_{\max} \text{ и } J=0,1,\dots,N2, \\ T_{I,N2,K} &= T_0, & T_{I,N2,K}^c &= T_0 \quad \text{при } K=0,1,\dots,K_{\max} \text{ и } I=0,1,\dots,N1. \end{aligned} \quad (35.2)$$

Условия (9.2)–(9.5) на границе жидкость ( $M$ ) – твердая фаза ( $S$ ) и на границе жидкость ( $M$ ) – вакуум ( $V$ ) также записываются в прямоугольной сетке (32).

При решении уравнений (33.1) и (33.2) можно использовать экономичную схему, так называемую схему переменных направлений (см., например, [44, 45]). В частности, при написании вычислительного алгоритма можно использовать попеременно-треугольный метод или продольно-поперечную схему Писмена–Рекфорда [44, 45]. 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 [44, 45].

#### 4. ПРИБЛИЖЕННЫЕ ОЦЕНКИ ТЕМПЕРАТУРЫ В ТРЕКЕ ИОНА

Как показано в работе [29], приближенный радиус трека тяжелого иона и, следовательно, перегретой области, можно представить в виде

$$r_{tr} = \{ [S_{inel0}/(\pi \eta)]^{1/2} \cdot \eta \xi_e / \alpha \}^{1/3}, \quad (36)$$

где  $\eta = C_e/T_e$ , а  $\xi_e = \chi_e/C_e$  – температуропроводность электронного газа. Выражение (36) получено в предположении, что  $T_e \gg T$ . Тогда выражение для температуры на расстоянии  $r$  от оси трека записывается как [29]

$$T(r) = \Psi \cdot S_{inel0} / [\pi r_{tr}^2 \cdot C_V] \cdot \exp(-r^2/r_{tr}^2). \quad (37)$$

Здесь  $\Psi$  – коэффициент, учитывающий долю  $\Delta E_L$  потерь энергии  $E$  тяжелой быстрой заряженной частицы, пошедшей на нагревание области со среднеквадратичным радиусом  $r_{tr}$ , то есть  $\Psi = \Delta E_L/E$ .

При получении выражений (36), (37) и ниже считается, что константы  $C_e(T_e)$ ,  $C(T)$  и  $\chi_e(T_e)$ ,  $\chi(T)$ , входящие в уравнения (1) и (2), не зависят от температуры. Однако при вычислениях используются их высокотемпературные значения.

Решение уравнения теплопроводности (2) для решеточной температуры без последнего члена в правой части имеет вид [27, 28, 48]

$$T(r,t) = \Psi \cdot S_{inel0} / (4 \cdot \pi \chi t) \cdot \exp[-r^2 \cdot C_V / (4 \cdot \chi t)]. \quad (38)$$

Полагая  $[r_{tr}(t)]^2 \equiv 4 \cdot \chi t / C_V$ , выражение (38) записываем как

$$T(r,t) = \Psi \cdot S_{inel0} / [\pi r_{tr}^2 \cdot C_V] \cdot \exp[-r^2/r_{tr}^2]. \quad (39)$$

Видно, что выражения (37) и (39) по форме совпадают. При  $r \neq 0$  максимум выражения (43) по времени достигается при  $t_m = r^2 \cdot C_V / (4 \cdot \chi)$  и имеет значение

$$T_m(r, t_m) = \Psi \cdot S_{\text{inel0}} / [\pi r_{\text{tr}}^2 \cdot C_V / \exp(1)]. \quad (40)$$

В пионерской работе по температурным пикам [23] выводится приближенное выражение для решеточной температуры ( $T(r, t)$ ). При этом искалось решение уравнения (1) для  $\Theta = T_c - T$ . Тогда

$$C_e \cdot [\partial \Theta / \partial t] = 1/r \cdot \partial [r \cdot \chi_e \cdot \partial \Theta / \partial r] / \partial r + \partial [\chi_e \cdot \partial \Theta / \partial z] / \partial z - g \cdot \Theta. \quad (41)$$

Решение этого уравнения имеет вид

$$T_c - T = S_{\text{inel0}} / [\pi r_{\text{ctr}}^2 \cdot C_e] \cdot \exp[-r^2 / r_{\text{ctr}}^2 - g \cdot t / C_e]. \quad (42)$$

После подстановки найденного решения в (2) находится уравнение [23]

$$C(T) \cdot [\partial T / \partial t] = 1/r \cdot \partial [r \cdot \chi(T) \cdot (\partial T / \partial r)] / \partial r + \partial [\chi(T) \cdot \partial T / \partial z] / \partial z + g \cdot S_{\text{inel0}} / [\pi r_{\text{ctr}}^2 \cdot C_e] \cdot \exp[-r^2 / r_{\text{ctr}}^2 - g \cdot t / C_e], \quad (43)$$

Выражение  $[r_{\text{ctr}}]^2 = r^2 \cdot C_e / (4 \cdot \chi_e \cdot t)$  – среднеквадратичный радиус распределения электронной температуры. Решение уравнения (43) может быть записано в виде [23]

$$T = g \cdot S_{\text{inel0}} / [4 \cdot \pi \cdot C_e \cdot C] \cdot \int_0^t \exp\{-r^2 / [\xi \cdot (t-t') + \xi_e \cdot t'] / 4 - g \cdot t' / C_e\} / [\xi \cdot (t-t') + \xi_e \cdot t'] \cdot dt'. \quad (44)$$

По теореме о среднем, заменим интеграл его значением при некотором  $t^*$  из интервала  $t^* \in (0, t)$ ; тогда выражение (46) можно, вводя новые переменные, записать в виде

$$r_{\text{tr}}^2 \equiv 4 \cdot \chi \cdot (t-t^*) / C \equiv 4 \cdot \xi \cdot (t-t^*) \quad \text{и} \quad r_{\text{ctr}}^2 = 4 \cdot \chi_e \cdot t^* / C_e \equiv 4 \cdot \xi_e \cdot t^*.$$



$$T(r,t)=g \cdot S_{\text{inel}} \cdot t / [\pi C_e \cdot C] \cdot \exp\{-r^2/[r_{\text{tr}}^2+r_{\text{ctr}}^2]\} / [r_{\text{tr}}^2+r_{\text{ctr}}^2] \cdot \exp[-g \cdot t^*/C_e], \quad (45)$$

Здесь  $\xi_e = \chi_e / C_e$  и  $\xi = \chi / C$  – температуропроводности электронного газа и решетки, соответственно. Представим  $t^*$  в виде  $t^* = \delta t$ , где  $0 < \delta < 1$ . Продифференцировав (45) по  $t$ , найдем значение  $t_m$ , при котором функция  $T(r,t)$  максимальна:

$$t_m = C_e / g \cdot [r/r_m], \quad (46)$$

где введено обозначение  $r_m \equiv \{4 \cdot C_e \cdot [\xi \cdot (1 - \delta) + \xi_e \cdot \delta] / g\}^{1/2}$ . При этом значение  $T(r,t)$  при  $t = t_m$  имеет вид

$$T(r,t_m) = S_{\text{inel}} / [\pi C \cdot r_m^2] \cdot \exp[-2 \cdot \delta^{1/2} \cdot (r/r_m)]. \quad (47)$$

Из выражения (47) видно, что оно напоминает приближенные выражения (37) и (39). Зависимость времени достижения максимальной температуры от константы электрон-фононного взаимодействия  $g$  достаточно сильная, а именно  $t_m \sim g^{-3/2}$ .

Приведем далее некоторые приближенные вычисления по приведенным выше выражениям. Вычисления выполнены с использованием приближенного выражения (38) при  $\Psi = 1$ . Последнее приближение является достаточно сильным, так как не учитывается диссипация энергии из области “трека” за счет электрон-электронных взаимодействий. Но для данных приближенных расчетов, чтобы понять основные закономерности, этого достаточно. Поэтому будем считать данные температурные расчеты относительными, с точностью до значения коэффициента  $\Psi \leq 1$ .

На рис.1 приведена зависимость “относительных” температур в треке тяжелого иона  $^{129}\text{Xe}$  с энергией 124 МэВ в кремнии для различных расстояний  $r = 1,5$  нм,  $r = 2,0$  нм,  $r = 2,5$  нм и  $r = 3,0$  нм от оси трека в

зависимости от времени при  $\Psi=1$ . Видно, что при уменьшении расстояния от оси трека  $r$  температура в максимуме по времени возрастает.

Параметры вычисления для кремния взяты для высоких температур  $C_V=2369,29$  кДж/(м<sup>3</sup>·К) при  $T=1500$  К и  $\chi=31$  Вт/(м·К) при  $T=1000$  К и для комнатных температур  $C_V=1509,84$  кДж/(м<sup>3</sup>·К) при  $T=250$  К,  $\chi=150$  Вт/(м·К) при  $T=300$  К [42].

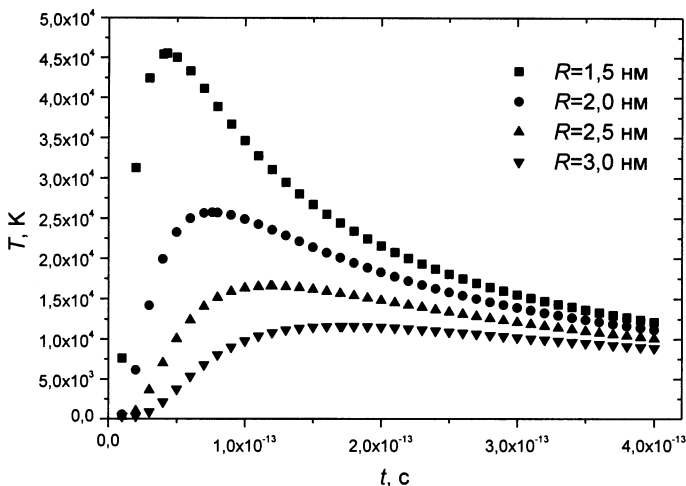


Рис.1. Зависимость температуры на расстояниях  $r=1,5, 2,0, 2,5$  и  $3,0$  нм от оси трека иона  $^{129}\text{Xe}$  с энергией 124 МэВ в Si в зависимости от времени. Параметры  $C_V$  и  $\chi$  взяты для высоких температур

На рис.2 представлены зависимости радиусов  $r_1$  и  $r_2$  от оси трека в областях вокруг траектории иона с “относительными” температурами, превышающими температуры плавления  $T_{\text{melt}}=1688$  К и температуры испарения-сублимации  $T_{\text{evap}}=3573$  К при значениях параметров  $C_V$  и  $\chi$  для низких (НТ) и высоких температур (ВТ) от времени  $t$ .

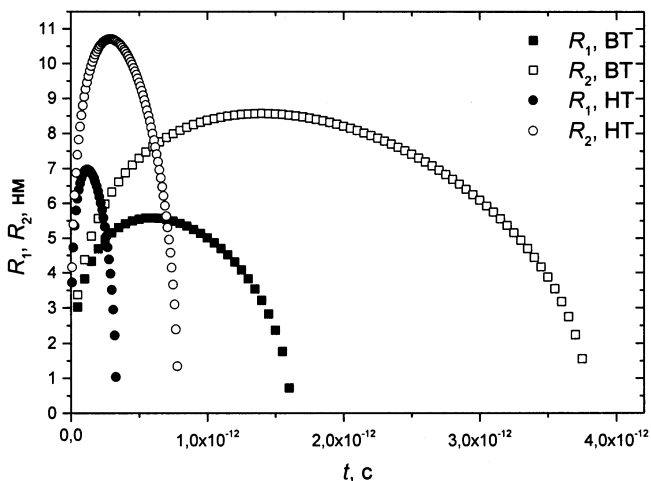


Рис.2. Зависимости радиусов  $r_1$  и  $r_2$  от оси трека в областях вокруг траектории иона с температурами, превышающими температуры плавления  $T_{\text{melt}}=1688$  К и температуры испарения-сублимации  $T_{\text{evap}}=3573$  К при значениях параметров  $C_V$  и  $\chi$  для низких и высоких температур, от времени  $t$

Видно, что для параметров, соответствующих низким температурам, область времен, когда возможно превышение температуры в треке над температурами испарения и плавления:  $t_{\text{evap}} \approx 3 \cdot 10^{-13}$  с и  $t_{\text{melt}} \approx 1,65 \cdot 10^{-12}$  с соответственно. В то же время для параметров, соответствующих высоким температурам, когда также возможно превышение температур в треке над температурами испарения и плавления, аналогичные величины имеют значения:  $t_{\text{evap}} \approx 8 \cdot 10^{-13}$  с и  $t_{\text{melt}} \approx 3,86 \cdot 10^{-12}$  с. Можно сделать вывод, что процессы испарения при временах  $t_{\text{evap}} \approx 3 \cdot 10^{-13}$  с, по-видимому, невозможны. В то же время без “перестройки” низкотемпературных значений параметров, таких как теплоемкость и теплопроводность, на параметры для высоких температур трудно ожидать значительных

температурных эффектов типа плавления и испарения атомов материала при облучении быстрыми тяжелыми ионами.

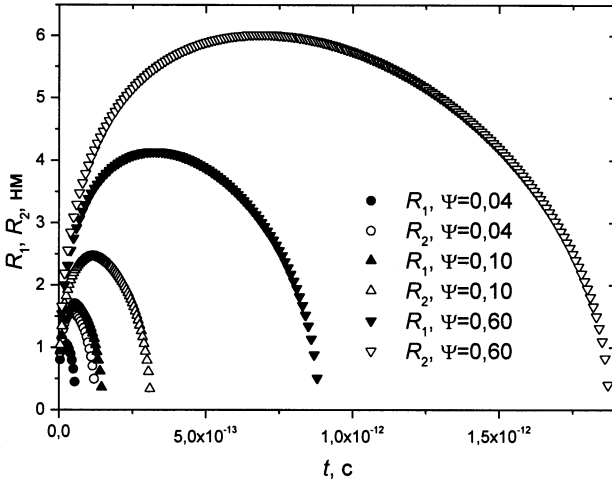


Рис.3. Зависимости радиусов  $r_1$  и  $r_2$  от оси трека в областях вокруг траектории иона с температурами, превышающими температуры плавления и температуры испарения-сублимации при значениях параметров  $C_V$  и  $\chi$  для высоких температур, от времени  $t$  при различных значениях параметра  $\Psi=0,04, 0,10, 0,60$

На рис.3 приведены зависимости радиусов  $r_1$  и  $r_2$  от оси трека в областях вокруг траектории иона с “относительными” температурами, превышающими температуры плавления и температуры испарения-сублимации  $T_{\text{evap}}=3573$  К при значениях параметров  $C_V$  и  $\chi$  для низких и высоких температур от времени  $t$  при различных значениях параметра  $\Psi=0,04, 0,10, 0,60$ . Случай с  $\Psi=1,00$  приведен на рис.2 (ВТ). Можно сделать вывод, что в зависимости от доли энергии “горячих” электронов, пошедшей на разогрев решетки (на рис.2 и 3 доля этой энергии составляет 4, 10, 60 и 100%), значительно изменяется временной масштаб

характерных времен  $t_{\text{evap}}$  и  $t_{\text{melt}}$ . При малых значениях этих времен маловероятны процессы с перегревом решетки.

## 5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Приведенные в разделах 2 и 3 выражения позволяют вычислить температуру в треке тяжелого иона как численно, так и с использованием приближенных выражений из раздела 3. 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 за счет 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.

Как известно, в металлических образцах, отличающихся совершенной структурой в пределах монокристалла-домена, треки от тяжелых заряженных частиц, как правило, не возникают. В то же время треки могут образовываться при наличии как собственных дефектов, внесенных при изготовлении материала (например, как в аморфных материалах при быстрой закалке расплава), или дефектов, созданных внешними механическими воздействиями (прокатка, обжатие, пластическая деформация и т.д.), так и радиационных дефектов высокой концентрации, созданных облучением нейтронами, тяжелыми ионами, электронами, кластерами ионов, а также границ раздела между кристаллитами (зернами, мозаичными блоками).

В частности, показано (см., например, [49]), что в структурах, состоящих из отдельных “мозаичных” блоков или областей с различной степенью дефектности, формируется прерывистый трек, который наблюдается в пределах различных блоков (участков повышенной дефектности) с относительно небольшими размерами и пропадает в блоках (участках) с большими размерами. Это обусловлено сильной зависимостью процесса передачи энергии от электронов атомам решетки при изменении длины свободного пробега электронов, которая уменьшается с ростом степени дефектности решетки. Отметим также влияние дефектов на изменение коэффициентов теплопроводности и электропроводности.

В работе [22] 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  $\sigma_{AM}=2\cdot\pi r_B^2=1,757\cdot 10^{-16}$  см<sup>2</sup>, а  $r_B=0,529\cdot 10^{-8}$  см – боровский радиус, а для монокристалла (наличие периодического потенциала и рассеяние электронов только на тепловых колебаниях атомов решетки) взято  $\sigma_{cr}=\sigma_{AM}\cdot[k_B\cdot T/(M\cdot V_S^2)]$ ; здесь  $M$  – масса атома решетки, а  $V_S$  – скорость звука.

Таким образом, в [22] 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  $t < 10^{-12}$  с, когда атомы решетки еще не образуют статистически равновесного ансамбля, требует учета волнового характера переноса энергии (см., например, [36, 50]), что и планируется в дальнейшем.

## ЛИТЕРАТУРА

1. D.Lesueur. Amorphisation par irradiation aux fragments de fission d'un alliage Pd-Si // *Radiat. Effects*. 1975, v.24, №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.Thome. Atomic displacements and atomic motion induced by electron excitation in heavy-ion-irradiated amorphous metallic alloys // *J. Phys: Condens. Matter*. 1993, v.5, №5, p.995-1018.
7. M.Toulemonde. Nanometric phase transformation of oxide materials under GeV energy heavy ion irradiation // *Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. B* 1999, v.156, №1-4, p.1-11.
8. R.Neumann. Scanning probe microscopy of ion-irradiated materials // *Nucl. Instr. and Meth. in 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. Instr. and Meth. in Phys. Res. B*. 1996, v.107, №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. Instr. and Meth. in Phys. Res. B*. 1989, v.43, №2, p.153-158.
11. А.Ю.Дидык. Радиационное воздействие тяжелых ионов на хромоникелевую сталь при высоких температурах // *Известия РАН. Металлы*. 1995, №3, с.128-135.

12. A.Yu.Didyk, 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, №1–4, p.119–124.
13. S.D.Brorson, A.Kazeroonian, J.S.Moodera, D.W.Face, T.K.Cheng, E.P.Ippen, M.S.Dresselhaus, G.Dresselhaus. Femtosecond room-temperature measurement of the electron-phonon coupling constant  $\lambda$  in metallic superconductors // *Phys. Rev. Lett.* 1990, v.64, №18, p.2172–2175.
14. H.W.K.Tom, G.D.Aumiller, C.H.Brito-Cruz. Time-resolved study of laser-induced disorder of Si surface // *Phys. Rev. Lett.* 1988, v.60, №14, p.1438–1441.
15. С.В.Каюков, А.А.Гусев, Е.Г.Зайчиков, А.Л.Петров, Ю.В.Афанасьев, И.Н.Завестовская, А.П.Канавин. Глубокое плавление металлов импульсным лазерным излучением миллисекундной длительности // *Известия РАН. Серия: физическая.* 1997, т.61, № 8, с.1546–1553.
16. Ю.В.Афанасьев, Н.Н.Демченко, И.Н.Завестовская, В.А.Исаков, А.П.Канавин, С.А.Урюпин, Б.Н.Чичков. Моделирование абляции металлов ультракороткими лазерными импульсами // *Известия РАН. Серия: физическая.* 1999, т.63, № 4, с.667–675.
17. С.И.Анисимов, Б.Ретфельд. К теории взаимодействия сверхкороткого лазерного импульса с металлом // *Известия РАН. Серия: физическая.* 1997, т.61, № 8, с.1642–1655.
18. 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, №11, p.3645–3652.
19. R.L.Fleisher, P.B.Price, R.M.Walker. *Nuclear Track in Solids.* – Los Angeles: University of California. 1975.
20. I.Baranov, P.Hakanson, S.Kirillov, J.Kopniczky, 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. Instr. and Meth. in Phys. Res. B.* 2002, v.193, p.798–803.
21. 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 Au<sub>5</sub> cluster ions // *Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. B.* 2002, v.193, p.809–815.
22. Yu.Yavlinskii. Track formation in amorphous metals under swift heavy ion bombardment // *Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. B.* 1998, v.146, № 1–4, p.142–146.
23. И.М.Лифшиц, М.И.Каганов, Л.В.Танатаров. К теории релаксационных изменений в металлах // *Атомная энергия.* 1959, т.6, с.391–402.



24. М.И.Каганов, И.М.Лифшиц, Л.В.Танатаров. Релаксация между электронами и решеткой // *ЖЭТФ*. 1956, т.31, № 2(8), с.232–237.
25. И.М.Лифшиц. О температурных вспышках в среде, подверженной действию ядерного излучения // *ДАН СССР*. 1956, т.109, № 6, с.1109–1111.
26. 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.
27. F.Seitz, J.S.Koehler // *Sol. St. Phys.*, 1956, v.2, p.251.
28. G.H.Vineyard. Thermal spikes and activated processes // *Radiat. Eff.* 1976, v.29, №4, p.245–248.
29. А.А.Давыдов, А.И.Калиниченко. Механические эффекты вблизи ионных треков и термических пиков // *Вопросы атомной науки и техники. Сер.: Физика радиационных повреждений и радиационное материаловедение*. Москва, 1985, вып.3(36), с.27–30.
30. C.Dufour, E.Lesellier de Chezelles, V.Delignon, M.Toulemonde // In: *Modifications induced by irradiation in glasses*. Ed.P.Massoldi, Amsterdam: North-Holland,1992, p.61.
31. C.Dufour, E.Paumier, M.Toulemonde // *Radiat. Eff. and Defects in Solids*. 1993, v.126, p.119.
32. 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.
33. I.S.Bitensky, P.Dimirev, B.U.R.Sundqvist. On model of fullerene formation from polymer unedr MeV ion impact // *Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. B*. 1998, v.82, p.356–361.
34. Yu.N.Yavlinskii. Calculation of energy loss of fast multicharged ions in solids // *Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. B*. 1994, v.90, p.62–63.
35. F.J.Blatt. *Theory of mobility of electrons in solids*. Academic Press, Inc. Publishers, New York, 1957.
36. 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 // *Докл. АН БССР*. 1987, т.31, № 7, с.609–611.
37. 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.
38. B.Bertmann, D.J.Sandiford. “Second sound” in solid helium // *Scientific American*. 1970, v.222, №5, p.92–99.
39. Ю.В.Мартыненко, Ю.Н.Явлинский. Охлаждение электронного газа металла при высокой температуре // *ДАН СССР*. 1983, т.270, № 1, с.88–91.

40. Ф.Ф.Комаров, А.П.Новиков, А.Ф.Буренков. *Ионная имплантация*. Минск, Изд. Университета, 1994, p.249.
41. A.Berthelot, S.Hemon, F.Gourbilleau, C.Dufour, E.Dooryhee, E.Paumier. Nanometric size effects on irradiation of tin oxide powder // *Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. B*. 1998, v.146, №1–4, p.437–442.
42. *Физические величины*. Справочник. Под ред. И.С.Григорьева, Е.З.Мейлиховой. М., Энергоатомиздат, 1991.
43. А.А.Тихонов, А.И.Самарский. *Уравнения математической физики*. М., Наука, 1977, 755 с.
44. Б.М.Будак, А.А.Самарский, А.А.Тихонов. *Сборник задач по математической физике*. М., Наука, 1972, 687 стр.
45. А.А.Самарский, А.В.Гулин. *Устойчивость разностных схем*. М., Наука, 1973, 415 с.
46. R.Behrisch. Evaporation for heat pulses on Ni, Mo, W and ATJ graphite as first wall materials // *J. Nucl. Mater.* 1980, v.93–94, p.498–504.
47. R.Hultgren, R.L.Orr, P.D.Andersen, K.K.Kelly. *Selected values of thermodynamic properties of metals and alloys*. Willey, 1972.
48. M.Nastasi, J.W.Mayer. Ion beam mixing and liquid interdiffusion // *Radiat. Eff. and Defects in Solids*. 1994, v.130–131, p.367–385.
49. P.I.Gaiduk, F.F.Komarov, W.Wesch. Damage evolution in crystalline InP during irradiation with swift Xe ions // *Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. B*. 2000, v.164–165, p.377–383.
50. А.П.Новиков, А.И.Урбанович, Н.В.Конг, О.С.Хадарина. Локальные тепловые и акустические процессы при торможении быстрых заряженных частиц в кристаллах // *Вестник БГУ*, сер.1. 1992, №1, с.10–13.
51. A.Missenard. *Conductivite thermique des solides, gaz et de leurs melanges*. Paris, Editions Eyrolles, 1965.
52. P.Sigmund, C.Claussen. Sputtering from elastic-collision spikes in heavy-ion-bombarded metals // *J. Appl. Phys.* 1981, v.52, №2, p.990–993.
53. M.Jakas. Fluid dynamics calculation of sputtering // *Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. B*. 2002, v.193, p.723–733.
54. A.Berthelot, F.Gourbilleau, C.Dufour, B.Domenges, E.Paumier. Irradiation of tin oxide nanometric powder with swift heavy ions // *Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. B*. 2000, v.166–167, p.927–932.
55. 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, №8, p. 4816–4829.

---

Получено 14 февраля 2003 г.

Дидык А. Ю., Робук В. Н., Семина В. К.

P17-2003-30

Температура в треке тяжелого иона  
с высокими удельными ионизационными потерями энергии  
в модели термического пика в материалах

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, то есть с двумя фазовыми переходами. Введено давление в области трека тяжелого иона и рассмотрено его влияние на изменение термодинамических параметров. Обсуждено влияние дефектов решетки на длину свободного пробега «горячих» электронов. Проведен численный анализ с использованием приближенных выражений для температуры решетки при высокотемпературных и низкотемпературных значениях параметров теплопроводности и теплоемкости.

Работа выполнена в Лаборатории ядерных реакций им. Г. Н. Флерова ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна, 2003

Перевод авторов

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

P17-2003-30

Heavy Ion Track Temperature  
with the High Level of Specific Inelastic Energy Loss  
in Materials at the Thermal Spike Model

The thermal spike model in materials under the irradiation by swift heavy ions with high specific energy loss is considered taking into account the temperature dependence along the ion trajectory. The numerical solutions of the temperature system equations for the temperatures of lattice and electrons are obtained, taking into account the possible heating of lattice up to the melting and evaporation points, i.e., with the two phase transitions are obtained. The pressure in the volume of heavy ion track and their influence on the changes of thermodynamical parameters are introduced. The influence of defects on the «hot» electron free path is discussed. The numerical analysis of the lattice temperature at low and high temperatures of the thermal conductivity and heat capacity parameter values was carried out.

The investigation has been performed at the Flerov Laboratory of Nuclear Reactions, JINR.

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna, 2003

**Редактор *М. И. Зарубина*  
Макет *Н. А. Киселевой***

**Подписано в печать 11.04.2003.**

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

**Усл. печ. л. 2,12. Уч.-изд. л. 2,0. Тираж 305 экз. Заказ № 53852.**

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

**E-mail: [publish@pds.jinr.ru](mailto:publish@pds.jinr.ru)**

**[www.jinr.ru/publish/](http://www.jinr.ru/publish/)**