

P11-2008-170

И. В. Амирханов, И. В. Пузынин, Т. П. Пузынина,
З. А. Шарипов

**МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ
ТЕПЛОВЫХ ПРОЦЕССОВ В МАТЕРИАЛАХ
ПРИ ОБЛУЧЕНИИ ТЯЖЕЛЫМИ ИОНАМИ
ВЫСОКИХ ЭНЕРГИЙ**

Направлено в журнал «Вестник Тверского государственного
университета»

Амирханов И. В. и др.

P11-2008-170

Математическое моделирование тепловых процессов
в материалах при облучении тяжелыми ионами высоких энергий

Представлен один из методов численного решения уравнений математической физики — конечно-разностный метод и его применение для уравнений модели термического пика. Выполнен численный анализ сходимости явной конечно-разностной схемы вычислений и метода переменных направлений, также исследованы эффективность и недостатки данных схем. Представлены полученные результаты исследования тепловых процессов в никеле при облучении ионами урана с энергией 700 МэВ с учетом потери энергии на фонные колебания. Оценены размеры областей в мишени, где температура превышает температуру плавления материала мишени и могут происходить фазовые переходы. Сделан сравнительный анализ с моделью, не учитывающей энергетические потери тяжелого иона на фонные колебания.

Работа выполнена в Лаборатории информационных технологий ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна, 2008

Amirkhanov I. V. et al.

P11-2008-170

Mathematical Modelling of Thermal Processes in Materials
at Irradiation by Heavy Ions of High Energies

In the work one of the methods of numerical solution of the equations of mathematical physics — the finite-difference method and its application for the equations of thermal spike model has been presented. The numerical analysis of convergence of an explicit finite-difference computational scheme and alternating direction method is carried out, and also the efficiency and deficiencies of these schemes are explored. The obtained results of investigation of thermal processes in nickel at irradiation by uranium ions of the energy 700 MeV with consideration of power losses by phonon oscillations are represented. The sizes of areas in the target, where temperature exceeds the melting point of a material of the target and phase changes can take place, are estimated. A comparative analysis with the model that does not take into account the energy losses of a heavy ion by phonon oscillations is made.

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

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna, 2008

ВВЕДЕНИЕ

В последние годы с возрастающим интересом проводятся экспериментальные исследования воздействий тяжелых заряженных частиц на материалы. К таким исследованиям относится, в частности, изучение особенностей радиационного распыления и изменения механических свойств материалов при облучении их тяжелыми ионами высоких энергий. Одна из моделей, описывающая тепловые процессы при воздействии тяжелых заряженных частиц на материалы, — это модель термического пика — система уравнений теплопроводности для электронного газа и решетки [1–5].

При прохождении тяжелых заряженных частиц через вещество теряемая частицей энергия в основном расходуется при непосредственном взаимодействии с ионами решетки (ядерные столкновения) и путем взаимодействия с электронами (ионизация, поляризация). При этом на взаимодействие с электронами расходуется большая часть энергии частиц ($\sim 90\%$ и более).

Компьютерная программа SRIM-2003 [6] позволяет вычислять потери энергии тяжелых ионов, которые затрачиваются на основные процессы, вызываемые тяжелым ионом при его прохождении через конденсированные среды, а именно:

- 1) на неупругие процессы потери энергии: $S_{\text{inel}}(Z) \equiv \left(-\frac{\partial E}{\partial Z}(Z)\right)_{\text{inel}}$;
- 2) на потери энергии в виде фононных возбуждений: $S_{\text{phonon}}(Z) \equiv \left(-\frac{\partial E}{\partial Z}(Z)\right)_{\text{phonon}}$.

При облучении никеля ионами урана с энергией 700 МэВ потери энергии следующие (SRIM-2003 [6]):

$$E_{\text{inel}} = \int_0^{Z_{\text{max}}} S_{\text{inel}}(Z) dz \approx 690 \text{ МэВ} (98,48\%),$$
$$E_{\text{phonon}} = \int_0^{Z_{\text{max}}} S_{\text{phonon}}(Z) dz \approx 10 \text{ МэВ} (1,52\%).$$

Одним из эффективных численных методов решения уравнений математической физики, возникающих для указанных выше задач, являются конечно-разностные методы [7–10].

В [2] применена модель термического пика для исследования тепловых процессов в никеле при облучении ионами урана высоких энергий без учета энергетических потерь на возбуждение фононных колебаний.

Целью настоящей работы является:

а) исследование сходимости и эффективности конечно-разностных схем для уравнений модели термического пика;

б) применение модели термического пика для исследования тепловых процессов в никеле с постоянными теплофизическими параметрами при облучении ионами урана с энергией 700 МэВ с учетом потери энергии на фононные колебания.

1. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

С учетом аксиальной симметрии система уравнений для определения решеточной и электронной температур в цилиндрической системе координат может быть записана в виде [2]

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

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

Ось z направлена перпендикулярно облучаемой поверхности мишени, т. е. по направлению движения тяжелого иона. Производная по углу отсутствует ввиду цилиндрической симметрии удельных ионизационных потерь тяжелого иона. Здесь $T_e(r, z, t)$ и $T_i(r, z, t)$ — температуры электронов и решетки; $C_e(T_e)$, $C_i(T_i)$ и $\lambda_e(T_e)$, $\lambda_i^{\parallel, \perp}(T_i)$ — соответственно удельные теплоемкости и теплопроводности электронов и решетки, зависящие от температуры. Символы « \perp » и « \parallel » означают, что теплопроводность для монокристаллов иногда зависит от направления, и они соответствуют направлениям вдоль и перпендикулярно поверхности. g — коэффициент, характеризующий взаимодействие электронной подсистемы с решеткой (в общем случае зависящий от температуры электронного газа). $A_e(r, z, t)$ и $A_i(r, z, t)$ — источник энергии, вносимый налетающим ионом урана в электронную и решеточную подсистемы соответственно, имеет следующий вид [11]:

$$A_e(r, z, t) \equiv b_e S_{\text{inel}0} \exp \left[-\frac{(t - t_{e0})^2}{2\sigma_{et}^2} \right] \exp \left(-\frac{r}{r_{e0}} \right) \mu_e(z),$$

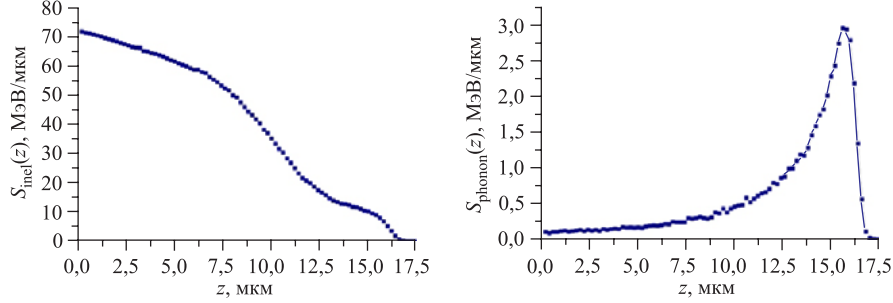


Рис. 1. Зависимость удельных ионизационных потерь энергии $S_{\text{inel}}(z)$ и потери энергии на возбуждение фоновых колебаний $S_{\text{phonon}}(z)$ ионов урана с энергией 700 МэВ от глубины в никеле (программа SRIM-2003 [6])

$$A_i(r, z, t) = b_i S_{\text{phonon}0} \exp\left[-\frac{(t - t_{i0})^2}{2\sigma_{it}^2}\right] \exp\left(-\frac{r}{r_{i0}}\right) \mu_i(z).$$

Здесь $S_{\text{inel}}(z) = S_{\text{inel}0} \mu_e(z)$ и $S_{\text{phonon}}(z) = S_{\text{phonon}0} \mu_i(z)$ — энергетические потери тяжелого иона на ионизацию и на возбуждение фоновых колебаний (рис. 1). Время достижения электронами равновесного распределения (т. е. время свободного пробега δ -электронов со средней энергией ε_e) $t_{e,i,0} \approx (1 - 5) \cdot 10^{-15}$ с, полуширина распределения по времени t принята равной $\sigma_{e,i,t} = t_{e,i,0}$ [11]. Скорость экспоненциального спада [12], или пространственная ширина высоковозбужденной области [13], $r_0 \leq 2,5$ нм (согласно данным работы [12]) и $r_0 \approx 1$ нм (см. [14]).

Нормирующий множитель $b_{e,i}$ определяется из условия нормировки

$$\int_0^{\infty} dt \int_0^{r_m} 2\pi r A_{e,i}(r, z, t) dr = S_{\text{inel,phonon}}(z) = S_{\text{inel,phonon}}(0) \mu_{e,i}(z);$$

здесь r_m — максимальный пробег δ -электронов, зависящий от максимальной энергии ε_e , передаваемой отдельному электрону [13, 14].

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

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

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

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

Здесь и далее R_{\max} — радиус удаления от траектории иона, а Z_{\max} — глубина, превышающая длину проективного пробега иона, при которых решетку можно считать невозмущенной, а ее температуру при $r > R_{\max}$ и $z > Z_{\max}$ равной T_0 . Тем самым начальные и граничные условия означают, что в начальный момент времени электронная и ионная подсистемы имеют температуру, равную комнатной, а граница $z = 0$ теплоизолирована. Кроме того, температуры электронного газа и решетки на большом расстоянии от траектории иона также равны комнатной температуре.

При решении системы уравнений (1), (2) целесообразно ввести безразмерные переменные, а именно: $\bar{T}_e = T_e/T_0$, $\bar{T}_i = T_i/T_0$, $\bar{r} = r/\Delta r$, $\bar{z} = z/\Delta z$, $\bar{t} = t/\Delta t$, где Δr , Δz и Δt — единицы измерения расстояния и времени. Эти единицы выбраны в виде $\Delta t = \alpha_1 t_0$ и $\Delta r = \Delta z = \alpha_2 r_0$. Здесь α_1 , α_2 — произвольные безразмерные константы. Значения этих констант положим равными: $\alpha_1 = \alpha_2 = 100$. Тогда систему уравнений (1), (2) в случае, если в кристалле нет анизотропии (т. е. $\lambda_i^{\parallel} = \lambda_i^{\perp} = \lambda_i$), можно записать в виде (здесь и далее верхние значки над безразмерными величинами опущены)

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

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

где $k_{e,i} = \lambda_{e,i}(T_0)\alpha_1 t_0 / (C_{e,i}(T_0)(\alpha_2 t_0)^2)$, $g_{e,i} = g(T_0)\alpha_1 t_0 / C_{e,i}(T_0)$.

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

$$T_{e,i}(r, z, 0) = 1, \quad (7)$$

$$\left. \frac{\partial T_{e,i}(r, z, t)}{\partial r} \right|_{r=0} = 0, \quad \left. \frac{\partial T_{e,i}(r, z, t)}{\partial z} \right|_{z=0} = 0, \quad (8)$$

$$T_{e,i}(R_{\max}, z, t) = T_{e,i}(r, Z_{\max}, t) = 1.$$

Безразмерная функция $A_{e,i}(r, z, t)$ определяется формулой

$$A_{e,i}(r, z, t) = A_{0,e,i} \exp(-\alpha_2 r) \exp(-\alpha_1(t - 0,05)^2/2) \mu_{e,i}(z),$$

здесь $A_{0,e,i} = b_{e,i} S_{\text{inel0,phonon0}} \alpha_1 t_0 / (C_{e,i}(T_0)T_0)$.

Функция $\mu(z)$ вычисляется по программе SRIM-2003 в виде таблицы (рис. 1). При численном моделировании эту функцию предварительно сглаживаем по методу наименьших квадратов и интерполируем кубическим сплайном.

При комнатной температуре $T_0 = 300$ К теплофизические параметры никеля следующие:

$$\begin{aligned} C_e(T_0) &= 2,733 \cdot 10^{-2} \text{ Дж}/(\text{см}^3 \cdot \text{К}), & C_i(T_0) &= 3,91 \text{ Дж}/(\text{см}^3 \cdot \text{К}), \\ g(T_0) &= 4,05 \cdot 10^{12} \text{ Вт}/(\text{см}^3 \cdot \text{К}), & \lambda_e(T_0) &= 4,1 \text{ Вт}/(\text{см} \cdot \text{К}), \\ \lambda_i(T_0) &= 0,91 \text{ Вт}/(\text{см} \cdot \text{К}), & S_{\text{inel}}(0) &= 1,157 \cdot 10^{-7} \text{ Дж}/\text{см}, \\ S_{\text{phonon}}(0) &= 1,635 \cdot 10^{-10} \text{ Дж}/\text{см}. \end{aligned}$$

Для приведенных величин безразмерные коэффициенты $k_e, k_i, g_e, g_i, A_{0,e}, A_{0,i}, R_{\text{max}}, Z_{\text{max}}$ принимают значения $k_e \approx 0,15; k_i \approx 2,33 \cdot 10^{-4}; g_e \approx 14,82; g_i \approx 0,1036; A_{0,e} \approx 8,97 \cdot 10^6; A_{0,i} \approx 88,51; R_{\text{max}} = 0,5; Z_{\text{max}} = 200$.

Таким образом, для численного решения системы уравнений (5), (6) с начальными и граничными условиями (7), (8) все параметры известны.

2. МЕТОД ЧИСЛЕННОГО РЕШЕНИЯ

Введем равномерную сетку по переменным в уравнениях (5), (6), т. е. положим

$$\{r_i = ih_r (i = 0, 1, \dots, n), z_j = jh_z (j = 0, 1, \dots, m), t_k = kh_t (k = 0, 1, \dots, l)\},$$

где h_r, h_z и h_t — соответственно шаги по переменным r, z и t . Во избежание путаницы индексов температуры электронной подсистемы и решетки обозначим \bar{T} и T соответственно. Тогда значения функций \bar{T} и T в узлах (r_i, z_j, t_k) обозначим символами $\bar{T}_{i,j}^k$ и $T_{i,j}^k$.

2.1. Двухслойная явная конечно-разностная схема. Для решения системы уравнений (5)–(8) в данном случае будем использовать следующую двухслойную явную конечно-разностную схему порядка аппроксимации $O(h_t + h_r^2 + h_z^2)$ (рис. 2, а) [7–10]:

$$\begin{aligned} \frac{\bar{T}_{i,j}^{k+1} - \bar{T}_{i,j}^k}{h_t} &= k_e \left[\frac{1}{ih_r} \frac{\bar{T}_{i+1,j}^k - \bar{T}_{i-1,j}^k}{2h_r} + \frac{\bar{T}_{i+1,j}^k - 2\bar{T}_{i,j}^k + \bar{T}_{i-1,j}^k}{h_r^2} + \right. \\ &\quad \left. + \frac{\bar{T}_{i,j+1}^k - 2\bar{T}_{i,j}^k + \bar{T}_{i,j-1}^k}{h_z^2} \right] - g_e(\bar{T}_{i,j}^k - T_{i,j}^k) + \bar{A}_{i,j}^k, \quad (9) \end{aligned}$$

$$\frac{T_{i,j}^{k+1} - T_{i,j}^k}{h_t} = k_i \left[\frac{1}{ih_r} \frac{T_{i+1,j}^k - T_{i-1,j}^k}{2h_r} + \frac{T_{i+1,j}^k - 2T_{i,j}^k + T_{i-1,j}^k}{h_r^2} + \frac{T_{i,j+1}^k - 2T_{i,j}^k + T_{i,j-1}^k}{h_z^2} \right] + g_i(\bar{T}_{i,j}^k - T_{i,j}^k) + A_{i,j}^k, \quad (10)$$

$$\bar{T}_{i,j}^0 = T_{i,j}^0 = 1, \quad (11)$$

$$\begin{aligned} \bar{T}_{n,j}^k = T_{n,j}^k = 1, & \quad \bar{T}_{i,m}^k = T_{i,m}^k = 1, \\ \frac{4\bar{T}_{1,j}^k - \bar{T}_{2,j}^k - 3\bar{T}_{0,j}^k}{2h_r} = 0, & \quad \frac{4\bar{T}_{1,j}^k - \bar{T}_{2,j}^k - 3\bar{T}_{0,j}^k}{2h_z} = 0, \\ \frac{4T_{1,j}^k - T_{2,j}^k - 3T_{0,j}^k}{2h_r} = 0, & \quad \frac{4T_{1,j}^k - T_{2,j}^k - 3T_{0,j}^k}{2h_z} = 0, \\ i = 1, 2, \dots, n, \quad j = 1, 2, \dots, m, \quad k = 0, 1, 2, \dots, l. \end{aligned} \quad (12)$$

При вычислении по данной схеме шаг по времени выбирается из условия устойчивости схемы [7–10]

$$\max_{k_e, k_i} h_t \left(\frac{1}{h_r^2} + \frac{1}{h_z^2} \right) \leq \frac{1}{2}. \quad (13)$$

Данная схема позволяет на каждом $(k + 1)$ -м временном шаге по известным значениям температур электронов и ионов на k -м временном слое находить их значения сначала во всех внутренних точках ($i = 1, 2, \dots, n - 1, j = 1, 2, \dots, m - 1$), а потом из дискретной записи граничных условий их значения в граничных точках ($i = 0, m; j = 0, n$).

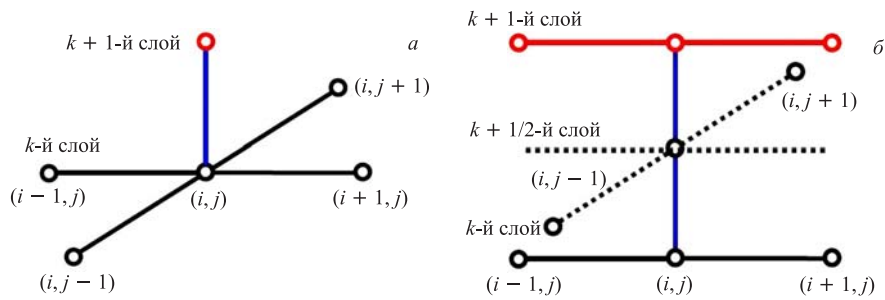


Рис. 2. Явная схема вычислений (а) и метод переменных направлений (б)

Для проверки сходимости схемы (9)–(12) проводился численный эксперимент при фиксированных шагах h_r , h_t и на сгущающейся сетке по z , т. е. $h_z, h_z/2, h_z/4$ ($h_r = 10^{-3}, h_z = 2 \cdot 10^{-2}, h_t = 3 \cdot 10^{-6}$).

Приведем результаты численного эксперимента в точке $r = 0,01, z = 25$ в момент времени $t = 0,5$:

$$\frac{\bar{T}_{h_z} - \bar{T}_{h_z/2}}{\bar{T}_{h_z/2} - \bar{T}_{h_z/4}} \approx 3,56, \quad \frac{T_{h_z} - T_{h_z/2}}{T_{h_z/2} - T_{h_z/4}} \approx 3,73.$$

Полученные результаты показывают второй порядок точности по переменной z . Аналогичные результаты численного эксперимента можно показать и по другим переменным. Преимущества этой схемы:

1) наглядность и простота в использовании, т. е. вероятность ошибки при составлении схемы минимальна;

2) количество арифметических операций в каждом временном слое минимально, поэтому есть возможность легко обобщить ее в многомерном случае.

Недостатком схемы является ограничение шага по времени, т. е. шаг по времени выбирается из условия устойчивости (13), и это в некоторых задачах приводит к резкому снижению эффективности из-за мелкого шага по времени.

2.2. Трехслойная конечно-разностная схема переменных направлений.

Эффективной схемой, сочетающей в себе лучшие стороны неявной схемы (абсолютная устойчивость) и явной схемы (меньшее количество операций), является метод переменных направлений [7–10]. Такие схемы называют экономичными схемами. Основная алгоритмическая идея их экономичности состоит в том, что для перехода со слоя k на слой $k + 1$ надо решать методом прогонки трехточечные разностные уравнения сначала по r , потом по z введенной сетки. Схематически представленная на рис. 2, б схема метода переменных направлений имеет порядок точности $O(h_t + h_r^2 + h_z^2)$. Для системы (5)–(8) трехслойная схема метода переменных направлений имеет следующий вид:

$$\begin{aligned} \frac{\bar{T}_{i,j}^{k+1/2} - \bar{T}_{i,j}^k}{h_t/2} = k_e \left[\frac{1}{ih_r} \frac{\bar{T}_{i+1,j}^{k+1/2} - \bar{T}_{i-1,j}^{k+1/2}}{2h_r} + \frac{\bar{T}_{i+1,j}^{k+1/2} - 2\bar{T}_{i,j}^{k+1/2} + \bar{T}_{i-1,j}^{k+1/2}}{h_r^2} + \right. \\ \left. + \frac{\bar{T}_{i,j+1}^k - 2\bar{T}_{i,j}^k + \bar{T}_{i,j-1}^k}{h_z^2} \right] - g_e(\bar{T}_{i,j}^k - T_{i,j}^k) + \bar{A}_{i,j}^k, \quad (14) \end{aligned}$$

$$\frac{T_{i,j}^{k+1/2} - T_{i,j}^k}{h_t/2} = k_i \left[\frac{1}{ih_r} \frac{T_{i+1,j}^{k+1/2} - T_{i-1,j}^{k+1/2}}{2h_r} + \frac{T_{i+1,j}^{k+1/2} - 2T_{i,j}^{k+1/2} + T_{i-1,j}^{k+1/2}}{h_r^2} + \frac{T_{i,j+1}^k - 2T_{i,j}^k + T_{i,j-1}^k}{h_z^2} \right] + g_i(\bar{T}_{i,j}^k - T_{i,j}^k) + A_{i,j}^k, \quad (15)$$

$$\frac{\bar{T}_{i,j}^{k+1} - \bar{T}_{i,j}^{k+1/2}}{h_t/2} = k_e \left[\frac{1}{ih_r} \frac{\bar{T}_{i+1,j}^{k+1/2} - \bar{T}_{i-1,j}^{k+1/2}}{2h_r} + \frac{\bar{T}_{i+1,j}^{k+1/2} - 2\bar{T}_{i,j}^{k+1/2} + \bar{T}_{i-1,j}^{k+1/2}}{h_r^2} + \frac{\bar{T}_{i,j+1}^{k+1} - 2\bar{T}_{i,j}^{k+1} + \bar{T}_{i,j-1}^{k+1}}{h_z^2} \right] - g_e(\bar{T}_{i,j}^{k+1/2} - T_{i,j}^{k+1/2}) + \bar{A}_{i,j}^{k+1/2}, \quad (16)$$

$$\frac{T_{i,j}^{k+1} - T_{i,j}^{k+1/2}}{h_t/2} = k_i \left[\frac{1}{ih_r} \frac{T_{i+1,j}^{k+1/2} - T_{i-1,j}^{k+1/2}}{2h_r} + \frac{T_{i+1,j}^{k+1/2} - 2T_{i,j}^{k+1/2} + T_{i-1,j}^{k+1/2}}{h_r^2} + \frac{T_{i,j+1}^{k+1} - 2T_{i,j}^{k+1} + T_{i,j-1}^{k+1}}{h_z^2} \right] + g_i(\bar{T}_{i,j}^{k+1/2} - T_{i,j}^{k+1/2}) + A_{i,j}^{k+1/2}. \quad (17)$$

Начальные и граничные условия записываются в виде

$$\bar{T}_{i,j}^0 = T_{i,j}^0 = 1, \quad (18)$$

$$\begin{aligned} \bar{T}_{n,j}^p &= T_{n,j}^p = 1, & \bar{T}_{i,m}^p &= T_{i,m}^p = 1, \\ \frac{4\bar{T}_{1,j}^p - \bar{T}_{2,j}^p - 3\bar{T}_{0,j}^p}{2h_r} &= 0, & \frac{4\bar{T}_{i,1}^p - \bar{T}_{i,2}^p - 3\bar{T}_{i,0}^p}{2h_z} &= 0, \\ \frac{4T_{1,j}^p - T_{2,j}^p - 3T_{0,j}^p}{2h_r} &= 0, & \frac{4T_{i,1}^p - T_{i,2}^p - 3T_{i,0}^p}{2h_z} &= 0, \end{aligned} \quad (19)$$

$$p = k, k + 1/2, \quad i = 1, 2, \dots, n, \quad j = 1, 2, \dots, m, \quad k = 0, 1, 2, \dots, l.$$

Для проверки сходимости схемы (14)–(19) так же, как в предыдущем пункте, проводился численный эксперимент при фиксированных шагах h_r, h_t на сгущающейся сетке по z , т. е. $h_z, h_z/2, h_z/4$ ($h_r = 10^{-3}, h_z = 2 \cdot 10^{-2}, h_t = 3 \cdot 10^{-6}$). Приведем результаты численного эксперимента в точке $r = 0,01$, $z = 25$ в момент времени $t = 0,5$:

$$\frac{\bar{T}_{h_z} - \bar{T}_{h_z/2}}{\bar{T}_{h_z/2} - \bar{T}_{h_z/4}} \approx 3,52, \quad \frac{T_{h_z} - T_{h_z/2}}{T_{h_z/2} - T_{h_z/4}} \approx 3,81.$$

Как и полученные выше результаты, они показывают второй порядок точности по переменной z . Аналогичные результаты численного эксперимента можно показать и по другим переменным.

Для исследования устойчивости схемы были проведены вычислительные эксперименты с различными шагами по всем переменным, и во всех случаях устойчивость схемы сохранялась. Например, в задачах, где коэффициент теплопроводности (или коэффициент диффузии) — очень большая величина, эффективность явной схемы резко падает из-за условия устойчивости (13), и в этом случае целесообразно использовать метод переменных направлений.

Преимущество этой схемы — ее абсолютная устойчивость. Недостатком схемы является невозможность ее обобщения на многомерный случай и сложность составления программ на практике.

3. ПОЛУЧЕННЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

Проведенное численное исследование показывает сильную зависимость результатов от условия учета потери энергии на фоновые возбуждения (или от действия функции источника $A_i(r, z, t)$ на решеточную подсистему).

На рис. 3 представлены температурные зависимости по глубине мишени для различных расстояний от оси OZ с учетом потери энергии тяжелого иона на фононы и без этого учета. Из представленного рисунка видно, что учет потери энергии на фоновые возбуждения приводит к резкому росту температуры в глубине мишени (в области остановки иона).

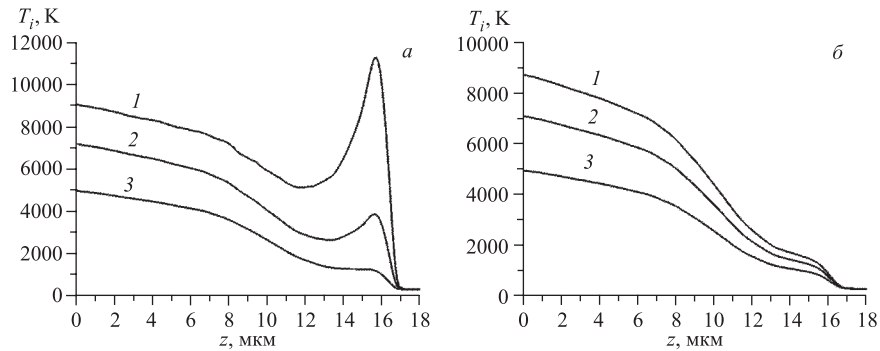


Рис. 3. Температурные зависимости по глубине мишени на различных расстояниях от оси OZ (1 — на оси вдоль траектории иона; 2 — при $r = 25 \text{ \AA}$; 3 — при $r = 50 \text{ \AA}$) с учетом прямых потерь энергии иона на фононы (а) и без учета (б) в момент времени $t = 6 \cdot 10^{-15} \text{ с}$

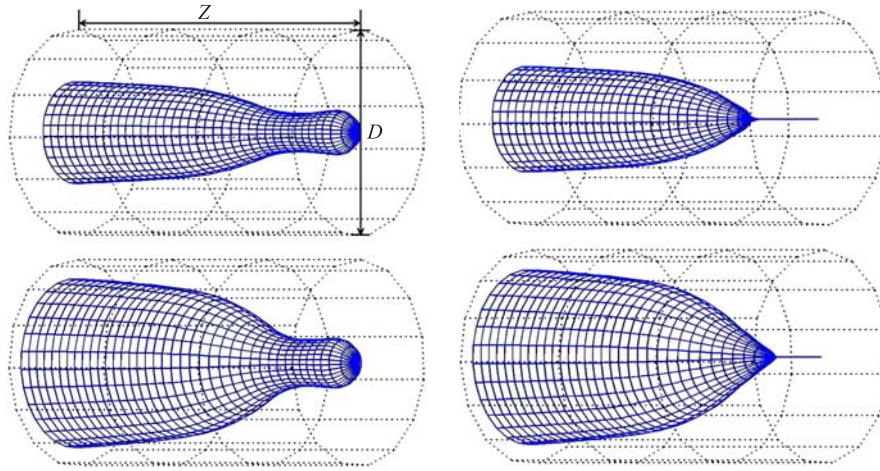


Рис. 4. Изотермическая поверхность, ограничивающая выделенный объем, в котором температура равна температуре плавления никеля в момент времени $t = 1,7 \cdot 10^{-14}$ с (верхний рисунок) и $t = 3,0 \cdot 10^{-14}$ с (нижний рисунок) с учетом (слева) потери энергии на фононы и без учета (справа). Размеры цилиндра, т. е. штрихованной области: диаметр $D = 280 \text{ \AA}$, глубина $Z = 16,8 \cdot 10^4 \text{ \AA}$

Учет суммарных энергетических потерь иона порядка 10 МэВ (расчет по программе SRIM-2003 [6]), которые непосредственно передаются в решеточную подсистему, способствуя ее нагреванию, резко поднимает температуру в области вблизи зоны останова иона (рис. 3, а, рис. 4 (левый пик)).

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе представлен один из методов численного решения уравнений математической физики — конечно-разностный метод и его применение для решения уравнений модели термического пика. Представлены полученные результаты исследования тепловых процессов в никеле при облучении ионами урана с энергией 700 МэВ с учетом потери энергии на фононные колебания. Выполнен численный анализ сходимости явной конечно-разностной схемы вычислений и метода переменных направлений. По применению численных методов можно сделать следующие выводы.

1. Выполненные расчеты показали эффективность явной конечно-разностной схемы вычислений на практике из-за ее простоты в использовании при соблюдении условия устойчивости (13).

2. Преимущество метода переменных направлений — его абсолютная устойчивость, т. е. нет ограничения на шаг по времени, и это позволяет эффективно применять его для задач, когда явная схема неэффективна из-за ограничения шага по времени.

По полученным результатам численного решения можно сделать следующие выводы.

1. Учет энергетических потерь на возбуждение фононных колебаний приводит к большему возрастанию температуры в глубине мишени в области остановки иона и размера области, где температура мишени превышает температуру плавления материала, чем в модели, где не учитываются энергетические потери на фононные колебания.

2. Выявленное anomальное поведение температуры в области остановки иона, которое ранее не было обнаружено и не предсказано теоретически, требует дальнейших исследований как с применением модели термического пика, так и экспериментальных.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, гранты №08-01-00800-а, 07-01-00738-а и 09-01-00770-а.

ЛИТЕРАТУРА

1. Каганов М. И., Лифшиц И. М., Танатаров Л. В. // АЭ. 1959. Т. 6. С. 391–402.
2. Амирханов И. В. и др. // Письма в ЭЧАЯ. 2006. Т. 3, № 1(130). С. 63–75.
3. Амирханов И. В. и др. // Письма в ЭЧАЯ. 2006. Т. 3, № 5(134). С. 80–91.
4. Амирханов И. В. и др. // ЭЧАЯ. 2006. Т. 37, вып. 6. С. 1592–1644.
5. Амирханов И. В. и др. // Поверхность. 2008. № 5. С. 1–10.
6. Biersack J. P., Haggmark L. G. // Nucl. Instr. Meth. B. 1980. V. 174. P. 257–269 (<http://www.srim.org>).
7. Самарский А. А. Теория разностных схем. М.: Наука, 1983. С. 258–276.
8. Самарский А. А., Гулин А. В. Численные методы. М.: Наука, 1989. 432 с.
9. Самарский А. А., Вабищевич П. Н. Вычислительная теплопередача. М.: Эдиториал УРСС, 2003. 784 с.
10. Турчак Л. И. Основы численных методов. М.: Наука, 1987. С. 277–284.
11. Dufour C., Paumier E., Toulemonde M. // Radiat. Eff. and Defects in Solids. 1993. V. 126. P. 119.
12. Waligorski M. R. P., Hamm R. N., Katz R. // Nucl. Tracks and Radiat. Meas. 1986. V. 11. P. 306–319.
13. Bitensky I. S., Dimirev P., Sundquist B. U. R. // Nucl. Instr. Meth. B. 1998. V. 82. P. 356–361.
14. Yavlinskii Yu. // Nucl. Instr. Meth. B. 1998. V. 146, No. 1–4. P. 142–146.

Получено 25 ноября 2008 г.

Редактор *Е. В. Сабеева*

Подписано в печать 30.01.2009.

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

Усл. печ. л. 0,87. Уч.-изд. л. 1,05. Тираж 310 экз. Заказ № 56484.

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

E-mail: publish@jinr.ru

www.jinr.ru/publish/