

P14-2012-104

А. Ю. Дидык¹, В. К. Семина¹, А. Хофман^{1,2},
Г. Н. Михайлова³, А. В. Троицкий³, Л. Х. Антонова³

**ТЕРМИЧЕСКИЕ ПРОЦЕССЫ
В МНОГОСЛОЙНЫХ ВТСП ВТОРОГО ПОКОЛЕНИЯ
ПРИ ОБЛУЧЕНИИ ТЯЖЕЛЫМИ ИОНАМИ
ВЫСОКИХ ЭНЕРГИЙ**

Направлено в журнал «Письма в ЭЧАЯ»

¹ Объединенный институт ядерных исследований, Дубна

² Национальный институт ядерных исследований, Отвоцк–Сверк, Республика Польша

³ Институт общей физики им. А. М. Прохорова РАН, Москва

Дидык А. Ю. и др.

P14-2012-104

Термические процессы в многослойных ВТСП второго поколения при облучении тяжелыми ионами высоких энергий

На основе развитой модели термического пика выполнены расчеты для многослойных ВТСП второго поколения Ag/YBaCuO/MgO/хастеллой при облучении ионами Ar, Kr и Xe с энергиями 1,2 МэВ/а.е.м. Проведено сравнение полученных расчетных результатов с имеющимися экспериментальными данными. Помимо этого изучены возможности протекания процессов плавления, рекристаллизации, аморфизации и других фазовых переходов при облучении ионами многослойных структур.

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

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна, 2012

Didyk A. Yu. et al.

P14-2012-104

Thermal Processes in Multi-Layered Second Generation HTSC under Swift Heavy Ion Irradiation

On the basis of the thermal spike model, the estimations with regard to ribbons of the second generation Ag/YBaCuO/MgO/Hastelloy HTSC under irradiation by Ar, Kr and Xe ions with an energy of about 1.2 MeV/a.m.u. have been carried out. The obtained results have been compared with available experimental data. In addition, the possibility of processes such as melting, recrystallization, amorphization and other phase transitions in multi-layered structures under ion irradiation has been studied.

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

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna, 2012

Основные положения и уравнения модели термического пика (МТП) были сформулированы достаточно давно [1]. Тем не менее до настоящего времени ее достаточно широко применяют для расчетов температурных эффектов и объяснения явлений, наблюдаемых при прохождении тяжелых ионов высоких энергий через материалы [2].

1. ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ТЕРМИЧЕСКОГО ПИКА

Систему уравнений МТП можно для многослойных структур записать в виде [2, 3]:

$$\begin{aligned}
C_e^j(T_e^j) \frac{\partial T_e^j}{\partial t} &= \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \lambda_e^j(T_e^j) \frac{\partial T_e^j}{\partial r} \right) + \\
&+ \frac{\partial}{\partial z} \left(\lambda_e^j(T_e^j) \frac{\partial T_e^j}{\partial z} \right) - g(T_e^j) \cdot (T_e^j - T_i^j) + A_{\text{ion}}^j(r, z, t), \\
C_i^j(T_i^j) \frac{\partial T_i^j}{\partial t} &= \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \lambda_i^j(T_i^j) \frac{\partial T_i^j}{\partial r} \right) + \\
&+ \frac{\partial}{\partial z} \left(\lambda_i^j(T_i^j) \frac{\partial T_i^j}{\partial z} \right) + g(T_e^j) \cdot (T_e^j - T_i^j) + A_{\text{phonon}}^j(r, z, t).
\end{aligned} \tag{1}$$

Индекс « j » описывает номер слоя, т. е. $j = 1, 2, \dots, N$, а N — число слоев; $j = 1$ (слой Ag) — $0,0 \leq z \leq 2,0$ мкм, $j = 2$ (слой ВТСП) — $2 \leq z \leq 3$ мкм и $j = 3$ (слой хастелоя) — $z \geq 3,0$ мкм. Индексы « i » и « e » относятся к параметрам, характеризующим решеточную и электронную подсистемы.

Представленную систему двух связанных нелинейных уравнений МТП следует дополнить функциями источников для уравнений, описывающих ионную и электронную подсистемы:

$$\begin{aligned}
A_{\text{ion}}^j(r, z, t) &= b_{\text{ion}} S_{\text{inel}}^j(z) \exp \left(-\frac{(t - t_{0,j})^2}{2\sigma_{t,j}^2} \right) \exp \left(-\frac{r}{r_0^j} \right), \\
A_{\text{phonon}}^j(r, z, t) &= b_{\text{phonon}} S_{\text{phonon}}^j(z) \exp \left(-\frac{(t - t_{0,j})^2}{2\sigma_{t,j}^2} \right) \exp \left(-\frac{r}{r_0^j} \right),
\end{aligned} \tag{2}$$

где $C_e^j, \lambda_e^j, C_i^j, \lambda_i^j$ — удельная теплоемкость и теплопроводность электронов и решетки; T_e^j, T_i^j — температура электронов и решетки; g — константа электрон-фононного взаимодействия; $A_{\text{ion}}^j(r, z, t), A_{\text{phonon}}^j(r, z, t)$ — функции источников, описывающих ионную и электронную подсистемы.

Функция источника для уравнения теплопроводности решетки, учитывающая потери энергии на фононные возбуждения $S_{\text{phonon}}^j(z)$, впервые введена в МТП в работе [3].

Неупругие потери энергии $S_{\text{inel}}^j(z)$ и фононные колебания $S_{\text{phonon}}^j(z)$, входящие в выражения (2), были вычислены с использованием компьютерной программы TRIM-2008 [4].

На рис. 1 представлены значения удельных ионизационных потерь энергии и сечения дефектообразования как функции глубины z в слоях для ионов $^{132}\text{Xe}^{27+}$ (167 МэВ), $^{84}\text{Kr}^{17+}$ (112 МэВ), $^{40}\text{Ar}^{8+}$ (48 МэВ), соответственно. Пороговые значения энергии смещения E_d^j , при которых происходит образование стабильных пар дефектов Френкеля (атомов в междоузельных положениях и вакансий в узлах решеток), для простоты вычислений и удобства при построении графиков для всех слоев считались одинаковыми, т. е. $E_d^j = 30$ эВ; N_j — атомные плотности в каждом слое, полученные с помощью компьютерной программы TRIM-2008. Плотность ВТСП ($\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$) была выбрана из литературы и считалась равной $5,51$ г/см³.

Выбор ионов для облучения был обусловлен желанием иметь различные сечения дефектообразования σ_j . Это потребовало использования достаточно тяжелых ионов с относительно высокими зарядами ядер ($Z_{\text{Ar}} = 18, Z_{\text{Kr}} = 36$ и $Z_{\text{Xe}} = 54$), с сильно различающимися значениями ионизационных энергетических потерь $S_{\text{inel}}^j(z)$ и, как следствие, создающими центры пиннинга вихрей Абрикосова различной конфигурации и размеров. Помимо этого, пробег ионов должен был заведомо превышать глубину залегания слоя ВТСП. Поэтому все эксперименты с тяжелыми ионами были проведены на образцах лент без медного покрытия.

Начальные и граничные условия для численного решения уравнений (1) можно записать в виде:

1. Начальные условия:

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

2. Граничные условия на границе раздела слоев:

$$\left. \frac{\partial T_{e,i}^j(r, z, t)}{\partial r} \right|_{r=0} = 0, \quad \left. \frac{\partial T_{e,i}^1(r, z, t)}{\partial z} \right|_{z=0} = 0, \quad \left. \frac{\partial T_{e,i}^m(r, z, t)}{\partial z} \right|_{z=0} = 0, \quad (4a)$$

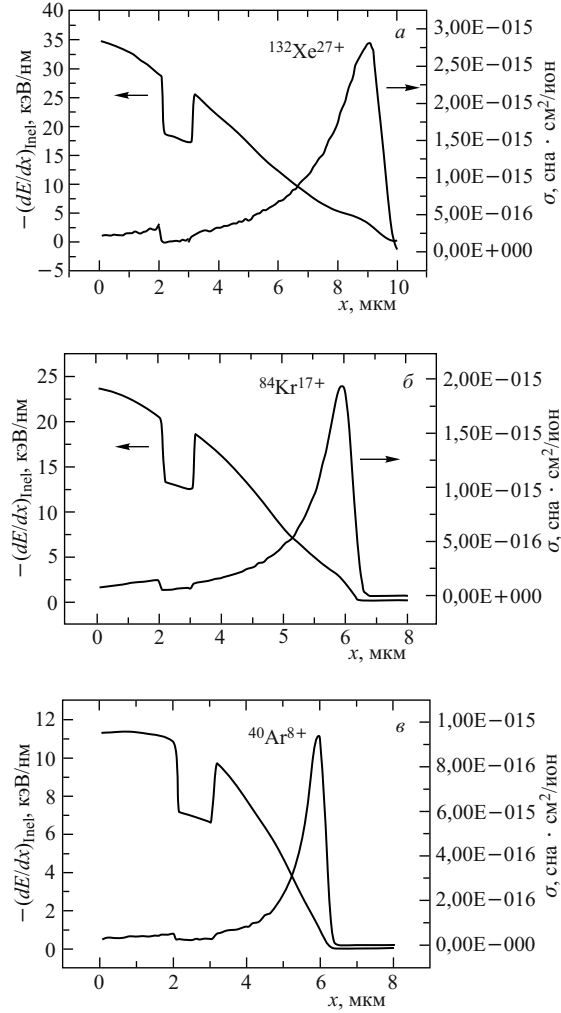


Рис. 1. Зависимость удельных ионизационных $S_{\text{inel}}(x)$ и упругих $S_{\text{el}}(x)$ потерь энергии от глубины x для ионов: a — $^{132}\text{Xe}^{27+}$ (167 МэВ); b — $^{84}\text{Kr}^{17+}$ (112 МэВ); c — $^{40}\text{Ar}^{8+}$ (48 МэВ)

$$\begin{aligned}
 T_{e,i}^j(R_{\text{max}}, z, t) &= T_{e,i}^j(r, Z_{\text{max}}, t) = \\
 &= T_{e,i}^m(R_{\text{max}}, z, t) = T_{e,i}^m(r, Z_{\text{max}}, t) = T_0. \quad (46)
 \end{aligned}$$

В выражениях (3), (4а), (4б) индекс $j = 1, 2, \dots, N$.

При этом на границе раздела слоев из-за различий в условиях изготовления таких многослойных систем и разнородности используемых материалов граничные условия могут быть двух типов:

- идеальный контакт с непрерывными значениями температур на границах раздела слоев и одинаковыми потоками тепла через границу раздела:

$$\begin{aligned} T_{e,i}^j(r, z = H_j - 0, t) &= T_{e,i}^{j+1}(r, z = H_j + 0, t), \\ \lambda_{e,i}^j(T_{e,i}^j) \frac{\partial T_{e,i}^j(r, z = H_j - 0, t)}{\partial z} &= \\ &= \lambda_{e,i}^{j+1}(T_{e,i}^{j+1}) \frac{\partial T_{e,i}^{j+1}(r, z = H_j + 0, t)}{\partial z}; \end{aligned} \quad (5)$$

- неидеальный контакт, с разрывом температур и одинаковыми потоками тепла через границу раздела:

$$\begin{aligned} \lambda_{e,i}^j(T_{e,i}^j) \frac{\partial T_{e,i}^j(r, z = H_j - 0, t)}{\partial z} &= \\ &= \lambda_{e,i}^{j+1}(T_{e,i}^{j+1}) \frac{\partial T_{e,i}^{j+1}(r, z = H_j + 0, t)}{\partial z}, \\ \lambda_{e,i}^j(T_{e,i}^j) \frac{\partial T_{e,i}^j(r, z = H_j - 0, t)}{\partial z} &= \\ &= \theta \left[T_{e,i}^j(r, z = H_j - 0, t) - T_{e,i}^{j+1}(r, z = H_j + 0, t) \right]. \end{aligned} \quad (6)$$

В выражениях (5) и (6) индекс $j = 1, 2, \dots, N - 1$.

Численные методы при решении системы уравнений (1) с функциями источников (2) и начальными и граничными условиями (3)–(6) описаны в работах [2, 3].

2. ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИЕ ПАРАМЕТРЫ ДЛЯ СЛОЕВ ВТСП ВТОРОГО ПОКОЛЕНИЯ Ag/YBaCuO/MgO/Hastelloy

При решении системы уравнений (1), (2) учитывалась зависимость теплофизических параметров (C, λ) от температуры.

Теплопроводность: $\lambda_i \sim 4 \text{ Вт/м} \cdot \text{К}$.

Параметры электронной подсистемы для ВТСП:

$$C_e(T_e) = \gamma T_e = 2,4 \cdot 10^{-4} \frac{\text{Дж}^3}{\text{см} \cdot \text{К}^2} \cdot T_e$$

$$\lambda_e(T_e) = D_e C_e = 0,624 \cdot 10^{-4} \frac{1}{T_e^2} \frac{\text{Вт}}{\text{см} \cdot \text{К}} \text{ при } T_e \leq T_F,$$

$$\lambda_e(T_e) = D_e C_e = 0,624 \cdot 10^{-4} T_e^{3/2} \frac{\text{Вт}}{\text{см} \cdot \text{К}} \text{ при } T_e > T_F.$$

Коэффициент электрон-фононного взаимодействия

$$g = \frac{18,75 \cdot 10^{11}}{\lambda(T_e)} \frac{\text{Вт}}{\text{см}^3 \cdot \text{К}}.$$

Ряд полученных расчетных зависимостей применительно к облучению ВТСП композитных лент Ag/YBaCuO/хастеллой представлен на рис. 2–4.

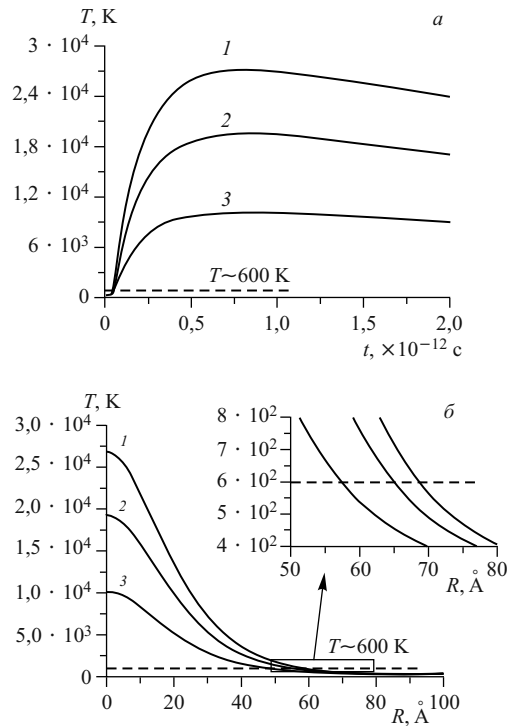


Рис. 2. Временная зависимость температуры решетки слоя ВТСП (глубина $z = 2,5$ мкм) (а) и радиальный профиль температуры слоя ВТСП (глубина $z = 2,5$ мкм) (б) при облучении различными ионами (1 — ксенон (167 МэВ); 2 — криптон (112 МэВ); 3 — аргон (48 МэВ)) в момент времени $t = 10^{-13}$ с; штриховой линией показано значение температуры, при котором начинается выделение кислорода и изменяются свойства ВТСП-слоя

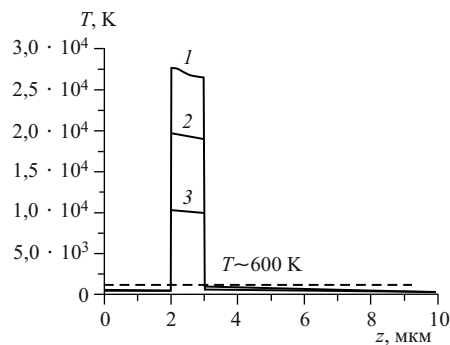


Рис. 3. Профиль температуры решетки по глубине трехслойной структуры Ag (2 мкм)/VTСП (1 мкм)/хастеллой при облучении различными ионами (1 — ксенон (167 МэВ), 2 — криптон (112 МэВ), 3 — аргон (48 МэВ)) в момент времени $t = 10^{-13}$ с

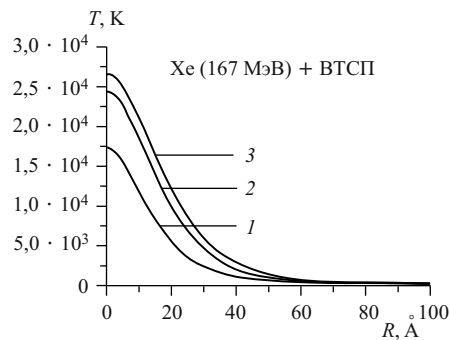


Рис. 4. Динамика роста температуры по радиальной зависимости (по R) слоя VTСП при облучении ионами ксенона в различные моменты времени (1 — $2 \cdot 10^{-14}$ с, 2 — $4 \cdot 10^{-14}$ с, 3 — $6 \cdot 10^{-14}$ с)

Параметры теплоемкости решетки для VTСП

T , К	C_i , Дж/кг·К	T , К	C_i , Дж/кг·К	T , К	C_i , Дж/кг·К
300	449	410	473	625	499
317	453	450	480	705	507
335	455	475	500	750	525
350	456	500	497	825	548
365	462	550	471	915	555
390	458	600	485	—	—

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Проведены расчеты в модели термического пика применительно к многослойным наноструктурам типа лент VTСП Ag/YBaCuO/MgO/хастеллой при облучении ионами $^{40}\text{Ar}^{8+}$, $^{84}\text{Kr}^{17+}$ и $^{132}\text{Xe}^{27+}$ с энергиями 1,2 МэВ/а. е. м.

В результате численного анализа при облучении трехслойного материала Ag/ВТСП/хастеллой ионами $^{40}\text{Ar}^{8+}$, $^{84}\text{Kr}^{17+}$ и $^{132}\text{Xe}^{27+}$ с энергией 1,2 МэВ/а. е. м. установлено, что может происходить фазовый переход твердое тело – плавление во всех трех слоях (в Ag, ВТСП и хастеллое), но не для всех ионов. На основе полученных результатов определены характерные размеры областей с локальными фазовыми переходами. Характерный диаметр локального разогрева ВТСП находится в хорошем согласии с предельными критическими флюенсами облучения, разрушающими сверхпроводимость второго рода в ВТСП, а также с диапазоном флюенсов, при которых наблюдается возрастание критического тока.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Лифшиц И. М.* О температурных вспышках в среде, подверженной действию ядерного излучения // Докл. АН СССР. 1956. Т. 109, № 6. С. 1109–1111.
2. *Амирханов И. В. и др.* Распыление твердых тел под действием тяжелых ионов и температурные эффекты в электронной и решеточной подсистемах // ЭЧАЯ. 2006. Т. 37, вып. 6. С. 1592–1644.
3. *Дидык А. Ю., Шарипов З. А.* Учет фонновых колебаний при прохождении тяжелых ионов высоких энергий через конденсированные среды в обобщенной модели термического пика // Матер. XIX Междунар. совещ. «Радиационная физика твердого тела», Севастополь, 31 авг. – 5 сент. 2009. М., 2009. С. 698–707.
4. *Biersack J. P., Haggmark L. G.* A Monte Carlo Computer Program for the Transport of Energetic Ions in Amorphous Targets // NIM. 1980. В174. P. 257–269; <http://www.srim.org>
5. *Амирханов И. В. и др.* Применение нелинейной модели термического пика для расчета температурных эффектов в двухслойных и многослойных структурах при облучении их ионами высоких энергий // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. 2009. № 12. С. 58–66.

Получено 3 октября 2012 г.

Редактор *М. И. Зарубина*

Подписано в печать 31.10.2012.

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

Усл. печ. л. 0,5. Уч.-изд. л. 0,62. Тираж 230 экз. Заказ № 57817.

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

E-mail: publish@jinr.ru

www.jinr.ru/publish/