

УДК 539.534.9, 53.072.23

РАЗВИТИЕ НЕПРЕРЫВНО-АТОМИСТИЧЕСКОГО МЕТОДА ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ ПРОЦЕССОВ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ТЯЖЕЛЫХ ИОНОВ С МЕТАЛЛАМИ

© 2018 г. Б. Батгэрэл^{1,3}, И. В. Пузынин¹, Т. П. Пузынина¹, И. Г. Христов²,
Р. Д. Христова², З. К. Тухлиев¹, З. А. Шарипов^{1,*}

¹Объединенный институт ядерных исследований, 141980 Дубна, Россия

²Софийский университет имени святого Климента Охридского, София, Болгария

³Институт физики и технологии, Академии наук Монголии, Улан-Батор, Монголия

*E-mail: zarif@jinr.ru

Поступила в редакцию 20.09.2017 г.

В работе представлено развитие непрерывно-атомистического подхода для моделирования процессов взаимодействия тяжелых ионов высоких энергий с металлами. Непрерывно-атомистическая модель описывается двумя разными классами уравнений, а именно, уравнениями теплопроводности с источником в модели термического пика и уравнениями движения материальных точек, облучаемых пучком, в модели метода молекулярной динамики. Для моделирования в рамках непрерывно-атомистической модели разработан программный комплекс. Получены результаты моделирования процессов облучения металлических мишеней тяжелыми ионами высоких энергий в зависимости от параметров функции источника и коэффициента электрон-фононного взаимодействия.

Ключевые слова: Модель термического пика, метод молекулярной динамики, структурные изменения, непрерывно-атомистический подход.

DOI: 10.7868/S0207352818070156

ВВЕДЕНИЕ

Непрерывно-атомистический подход для моделирования процессов взаимодействия тяжелых ионов высоких энергий (ТИВЭ) с различными материалами базируется на уравнении теплопроводности электронного газа модели термического пика (ТП) [1–3] и уравнениях движения атомов метода молекулярной динамики (МД) [4], то есть представляет комбинацию двух моделей. Такая комбинация в отличие от метода МД позволяет рассматривать процессы в широком диапазоне энергии налетающего тяжелого иона на мишень (так как при высоких энергиях налетающего иона преобладают неупругие потери энергии и метод МД не работает), а в отличие от модели ТП позволяет получить более детальную информацию о моделируемой системе. Непрерывно-атомистическая модель (НАМ) [5, 6] была предложена в 2003 году для описания воздействия коротко-импульсных лазеров на металлические мишени. Воздействие лазера и облучение тяжелыми ионами высоких энергий в некотором смысле схожие процессы: в обоих случаях происходит возбуждение электронов кристаллической решетки. При этом в электронной подсистеме

мишени полученная энергия от налетающей частицы аккумулируется с последующей передачей к решетке. Это главный процесс, который во многом влияет на последующие процессы в облучаемом материале. Важно отметить, что величина теплоемкости электронного газа на два порядка меньше теплоемкости решетки, но температура электронного газа может достигать значений от сотни тысяч до нескольких миллионов кельвинов. Следовательно, электронная подсистема может аккумулировать в себе достаточно большое количество энергии. Модель ТП, описываемая системой уравнений теплопроводности для электронного газа и решетки была основана на идее передачи энергии от электронного газа к решетке, а НАМ введен заменой уравнения теплопроводности решетки уравнениями движения атомов метода молекулярной динамики. К настоящему времени количество работ по применению НАМ для ТИВЭ мало, что отчасти связано с отсутствием готовых прикладных программ моделирования.

Применение комбинированных методов требует разработки новых численных схем, алгоритмов и комплексов программ. Так как комбинированные

модели состоят из уравнений двух разных классов, особое внимание необходимо уделить согласованности численных методов для обоих классов уравнений. Моделирование в рамках комбинированного подхода требует значительных вычислительных ресурсов, и для этого необходима разработка новых параллельных алгоритмов для многопроцессорных вычислительных систем. Для проведения моделирования разработан программный комплекс с возможностью использования на высокопроизводительных вычислительных системах [7].

Целью работы является моделирование процессов облучения металлических мишеней ТИВЭ в рамках НАМ в зависимости от параметров функции источника и коэффициента электрон-фононного взаимодействия, а также развитие и уточнение возможностей НАМ для описания имеющихся экспериментальных данных.

ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

За основу НАМ взята непрерывно-атомистическая модель [5], описывающая процессы в металлической пленке при воздействии коротко-импульсного лазера. Аналогичная модель при облучении тяжелыми ионами на основе [5] была предложена в работе [6]. Предлагаемая нами модель представлена непрерывным уравнением теплопроводности электронной подсистемы модели ТП в декартовой системе координат (x, y) и уравнениями движения атомов в рамках метода МД:

$$C_e(T_e) \frac{\partial T_e}{\partial t} = \text{div}(\lambda_e \text{grad}(T_e)) - g(T_e)(T_e - T_i) + A(x, y, t), \quad (1)$$

$$m_i \frac{\partial^2 \mathbf{r}_i}{\partial t^2} = \mathbf{F}_i + \zeta m_i \mathbf{v}_i^T, \quad i = 1, \dots, n, \quad (2)$$

где

$$\zeta = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n g(T_e) V_n (T_e^k - T_i) / \sum_i m_i (v_i^T)^2, \quad i = 1, \dots, n,$$

$$A(x, y, t) = b S_{\text{inel}}(0) \exp\left(-\frac{(t - t_0)^2}{2\sigma_t^2}\right) \times \exp\left(-\frac{\sqrt{(x - x_0)^2 + (y - y_0)^2}}{r_0}\right).$$

Подробное описание уравнения (1) приведено в работе [3], а уравнения (2) — в работах [5, 6]. Важным фактором НАМ является подбор функции источника $A(x, y, t)$ в уравнении (1) и коэффициента электрон-фононного взаимодействия $g(T_e)$. Функция источника определяет, как

происходят потери энергии налетающего тяжелого иона в мишени по времени и объему. Известная программа SRIM-2013 [8] с помощью метода Монте-Карло позволяет вычислять энергетические потери тяжелого иона в различных мишенях в единице объема, и это используется в определении функции источника. Время действия t_0 источника на мишень в работе [9] оценивается $\sim 10^{-15}$ с для тяжелых ионов высоких энергий, радиус высоковозбужденной области $r_0 \approx 1$ нм [10, 11]. Эти параметры определяют распределения энергии по времени и объему, а для тяжелых ионов с разными энергиями они, соответственно, должны изменяться в определенном диапазоне. Коэффициент электрон-фононного взаимодействия $g(T_e)$ определяет передачу энергии из электронного газа к решетке и зависит от многих физических параметров [12]. При моделировании эти параметры можно варьировать в определенных пределах, учитывая сохранение нормировки интеграла от функции источника [3].

В данной работе в качестве примера рассматривается облучение никеля ионами урана с энергией 700 МэВ для различных значений параметров r_0 функции источника и коэффициента $g(T_e)$. Выбор мишени и налетающего иона связан с тем, что авторами в предыдущих работах [3, 13] было выполнено предварительное моделирование комбинации ион-мишень (уран(700Мэв)—никель) в рамках модели термического пика. Использование двухмерной модели НАМ обусловлено тем, что моделируются процессы в тонком (толщина 1–10 нм) материале.

МЕТОД ЧИСЛЕННОГО РЕШЕНИЯ

Для решения уравнения (1) вводится равномерная сетка в расчетной области и используется конечно-разностный метод [13, 14].

В рамках классической молекулярной динамики для интегрирования уравнений движения частиц (2) обычно используется метод Верле. Часто используемыми модификациями метода Верле являются методы Velocity Verlet и Leapfrog Verlet [15].

При решении системы (2) важным этапом является вычисление температурного поля облучаемого материала. Для этого в уравнении (2) расчетная область разбивается на наложенные друг на друга ячейки так, чтобы в каждой ячейке количество частиц было 100–1000, и вычисляется температура в каждой ячейке. Отличие этого подхода от работы [5] заключается в том, что таким образом можно увеличить плотность точек температурного поля мишени.

В вычислительных схемах для решения уравнений (1)–(2) необходимо сохранить:

- 1) согласованность шагов по времени;

2) температурную связь в узловых точках конечно-разностного метода и в ячейках расчетной области метода МД.

Для решения системы (1)–(2) был разработан программный комплекс ТП-МД с использованием на многопроцессорных системах с общей памятью в рамках стандарта OpenMP. Результаты тестирования программного комплекса ТП-МД приведены в работе [7].

ПОЛУЧЕННЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Моделирование процесса взаимодействия ионов урана с никелевой мишенью проводилось следующим образом.

В первом случае в качестве мишени выбран образец никеля с размерами $35 \times 35 \times 1.1$ нм с количеством частиц 140 700 и различными параметрами $r_0 = 0.5, 1, 2$ нм и $g = g_{Ni}$. Физические параметры уравнения (1) для никеля берутся из работы [3]. В методе МД в качестве межчастичного потенциала использовался EAM потенциал [16]. Визуализация полученных результатов выполнена с помощью программы OVITO [17].

На рис. 1–3 приведены полученные результаты, соответственно, с параметрами $r_0 = 0.5, 1, 2$ нм в моменты времени $t_1 = 100$ фс и $t_2 = 300$ фс (верхний рисунок – вид сверху и нижний рисунок – вид под углом).

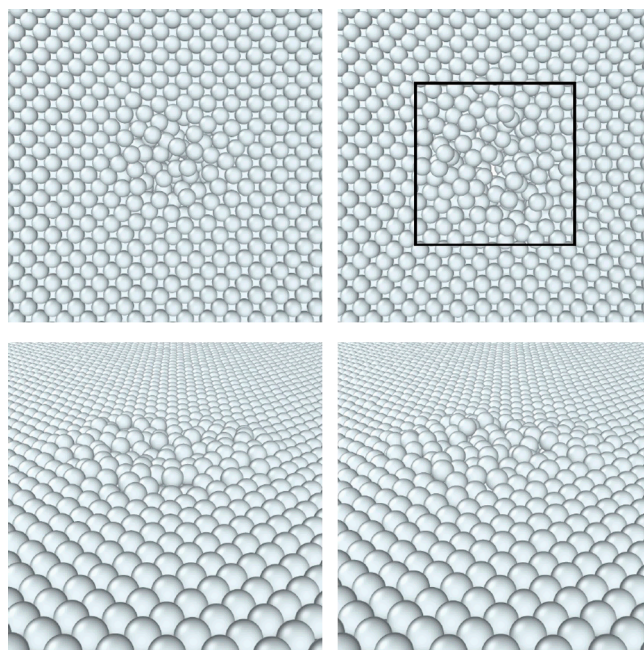


Рис. 2. Динамика разрушения кристаллической решетки в моменты времени $t_1 = 100$ фс и $t_2 = 300$ фс (верхний рисунок – вид сверху и нижний рисунок – вид под углом) для параметра $r_0 = 1$ нм.

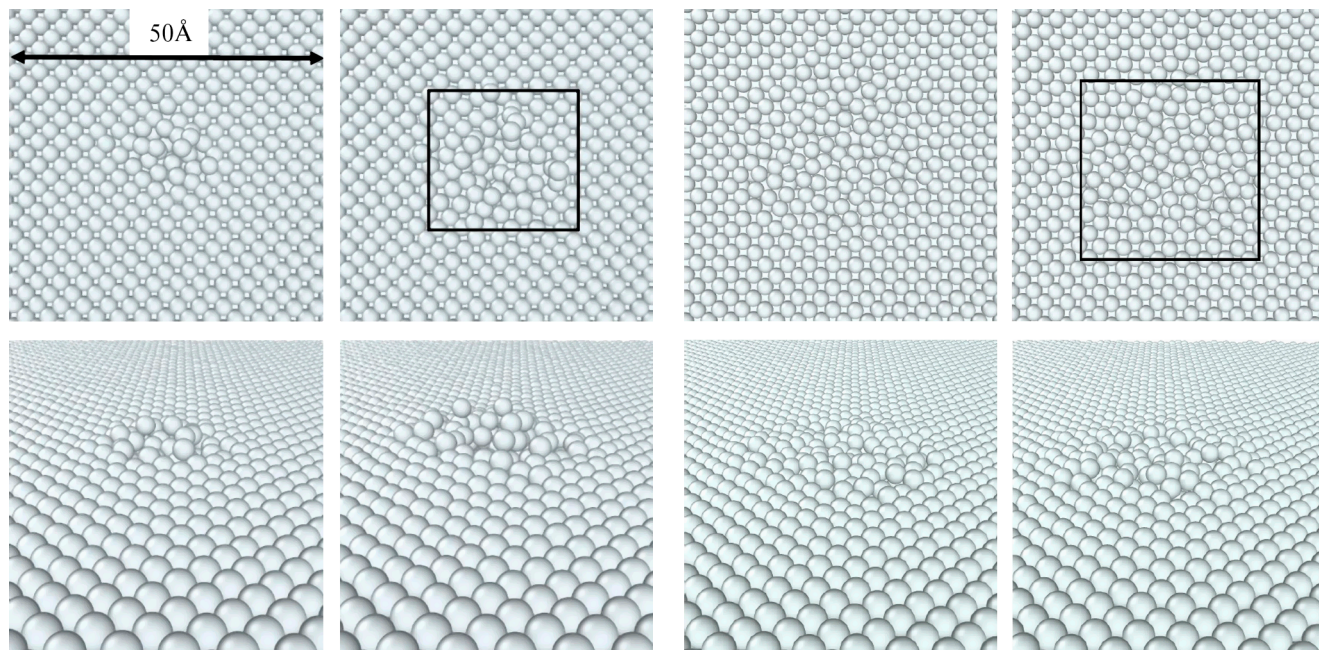


Рис. 1. Динамика разрушения кристаллической решетки в моменты времени $t_1 = 100$ фс и $t_2 = 300$ фс (верхний рисунок – вид сверху и нижний рисунок – вид под углом) для параметра $r_0 = 0.5$ нм.

Рис. 3. Динамика разрушения кристаллической решетки в моменты времени $t_1 = 100$ фс и $t_2 = 300$ фс (верхний рисунок – вид сверху и нижний рисунок – вид под углом) для параметра $r_0 = 2$ нм.

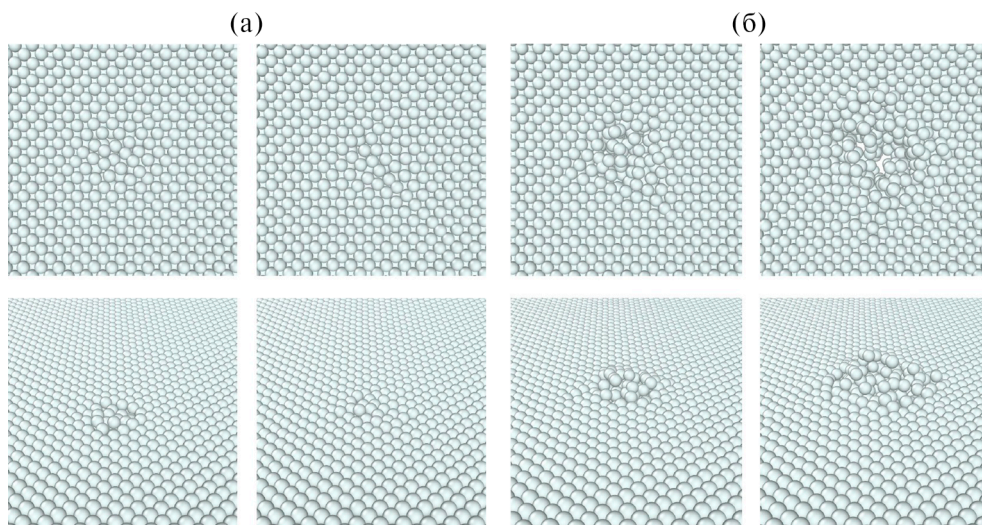


Рис. 4. Динамика разрушения кристаллической решетки для параметра $g = 0.5 g_{Ni}$ (а) и $g = 2g_{Ni}$ (б) в моменты времени $t_1 = 100$ фс и $t_2 = 300$ фс (верхний рисунок – вид сверху и нижний рисунок – вид под углом).

В этих рисунках квадратом выделена область разрушений кристаллической решетки. Из полученных рисунков видно, что при малых параметрах r_0 в малой области происходит сильное разрушение кристаллической решетки (это видно из рисунков под углом), а при больших параметрах область разрушений увеличивается, но характер разрушений не сильно изменяется. Эти результаты показывают зависимость модели от параметра r_0 . При изменении этого параметра изменяется плотность распределения энергии по пространству, что отражено в результатах. Параметр r_0 функции источника для ТИВЭ в работах [10, 11] оценивается в пределах 1–2.5 нм.

На втором этапе меняем коэффициент электрон-фононного взаимодействия: $g_1 = 0.5g_{Ni}$, $g_2 = 2g_{Ni}$. Полученные результаты приведены на рис. 4 в моменты времени $t_1 = 100$ фс и $t_2 = 300$ фс. Результаты показывают влияние изменения коэффициента электрон-фононного взаимодействия на разрушение решетки, то есть увеличение значения g приводит к увеличению передачи энергии к решетке. Теоретическое описание электрон-фононного взаимодействия приведено в работах [2, 12], а близкие к реальным характеристики можно получить только путем моделирования и сравнения с экспериментальными данными [3, 18]. Наиболее важным и интересным результатом при взаимодействии ТИВЭ с твердыми телами является формирование пространственных разрушений кристаллической решетки – треков [18] вблизи траектории ТИВЭ. Экспериментальные оценки размера трека ТИВЭ в металлах составляет 3–7 нм [3, 18].

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

С помощью разработанного программного комплекса НАМ получены результаты моделирования взаимодействия иона урана с энергией 700 МэВ с никелевой мишенью в зависимости от параметров функции источника и коэффициента электрон-фононного взаимодействия. НАМ позволяет исследовать более детальную картину процесса взаимодействия ТИВЭ с металлическими мишенями с учетом экспериментальных данных. По результатам моделирования можно сделать выводы:

1. Изменение параметра r_0 в функции источника существенно влияет на результаты, поэтому он должен меняться в зависимости от энергии налетающего иона и типа иона. Этот фактор становится значительным, когда моделируется прохождение иона в глубине мишени, так как движущийся ион на половине пути пробега теряет более 70–80% от первоначальной энергии в зависимости от различных факторов.
2. Выбор коэффициента электрон-фононного взаимодействия определяется сравнением с экспериментальными данными, так как соответствует количеству переданной энергии от электронов к решетке.

БЛАГОДАРНОСТИ

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ № 17-01-00661-а и гранта Полномочного представителя Республики Болгария в ОИЯИ.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Лифшиц И.М.* // ДАН СССР. 1956. Т. 109. № 6. С. 1109.
2. *Каганов М.И., Лифшиц И.М., Танатаров Л.В.* // Атомная Энергия. 1959. Т. 6. С. 391.
3. *Амирханов И.В., Дидык А.Ю., Хофман А. и др.* // ЭЧАЯ. 2006. Т. 37. Вып. 6. С. 1592.
4. *Холмуродов Х.Т., Алтайский М.В., Пузынин И.В. и др.* // ЭЧАЯ. 2003. Т. 34. Вып. 2. С. 472.
5. *Ivanov D. and Zhigilei L.* // Phys. Rev. B68. 2003. P. 064114.
6. *Rutherford A.M. and Duffy D.M.* // J. Phys.: Condens. Matter 19. 2007. P. 496201.
7. *Dimova S., Puzynin I., Puzynina T. et al.* // CEUR Workshop Proceedings. V. 1787. P. 184.
8. *Biersack J.P., Haggmark L.G.* // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B. 1980. V. 174. P. 257.
9. *Dufour C. et al.* // Rad. Eff. & Def. in Solids. 1993. V. 126. P. 119.
10. *Waligorski M.R. P., Hamm R.M., Katz R.* // Nucl. Tracks and Rad. Meas. 1986. V. 82. P. 356.
11. *Yavlinskii Yu.N.* // Nucl. Instrum. Methods. B. 1998. V. 146. P. 142.
12. *Wang Z.G. et al.* // J. Phys.: Condens. Matter. 1994. V. 6. P. 6733.
13. *Амирханов И.В., Пузынин И.В., Пузынина Т.П. и др.* // Вестник ТвГУ. 2009. № 8. С. 17.
14. *Самарский А.А., Гулин А.В.* Численные методы. М.: Наука, 1989. 432 с.
15. *Verlet L.* // Phys.Rev.1967. V. 159 N. 1. P. 98.
16. *Holian, B. L., et al.* // Phys. Rev. A 43. 1991. N6. P. 2655.
17. *Stukowski A.* // Modeling Simul. Mater. Sci. Eng. 2009. V. 18(1). P. 015012.
18. *Комаров Ф.Ф.* // УФН. 2003. Т. 173. С. 1287.

The Evolution of Continuum-Atomistic Method to Modeling Interaction Processes of Heavy Ions with Metals

**B. Batgerel, I. V. Puzynin, T. P. Puzynina, I. G. Hristov,
R. D. Hristova, Z. K. Tukhliev, Z. A. Sharipov**

The work presents the application of continuum-atomistic approach to modeling interaction processes of high energy heavy ions with metals. The continuous-atomistic model is described by two different classes of equations, namely, the heat conduction equations with the source in the thermal spike model and equations of motion irradiated by a beam of material points, the method of molecular dynamics. A software package has been developed for modeling using the continuous-atomistic model. The results of modeling the irradiation of metal targets by high-energy heavy ions are obtained depending on the parameters of the source function and the electron-phonon interaction coefficient.

Keywords: the thermal spike model, method of molecular dynamics, the continuous-atomistic model.