

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

*А. Ю. Дидык^а, В. К. Семина^а, А. Хофман^{а,б},
Г. Н. Михайлова^в, А. В. Троцкий^в, Л. Х. Антонова^в*

^а Объединенный институт ядерных исследований, Дубна

^б Национальный центр ядерных исследований, Отвоцк–Сверк, Республика Польша

^в Институт общей физики им. А. М. Прохорова РАН, Москва

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.

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.

PACS: 02.60.Cb; 02.90.+p

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 [2–4]:

$$C_e^j(T_e^j) \frac{\partial T_e^j}{\partial t} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \lambda_e^j(T_e^j) \frac{\partial T_e^j}{\partial r} \right) + \\ + \frac{\partial}{\partial z} \left(\lambda_e^j(T_e^j) \frac{\partial T_e^j}{\partial z} \right) - g(T_e^j) (T_e^j - T_i^j) + A_{\text{ion}}^j(r, z, t),$$

$$C_i^j(T_i^j) \frac{\partial T_i^j}{\partial t} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \lambda_i^j(T_i^j) \frac{\partial T_i^j}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\lambda_i^j(T_i^j) \frac{\partial T_i^j}{\partial z} \right) + g(T_e^j) (T_e^j - T_i^j) + A_{\text{phonon}}^j(r, z, t). \quad (1)$$

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 хастеллоя) — $z \geq 3,0$ 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:

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

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

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, описывающие 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 [5].

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.

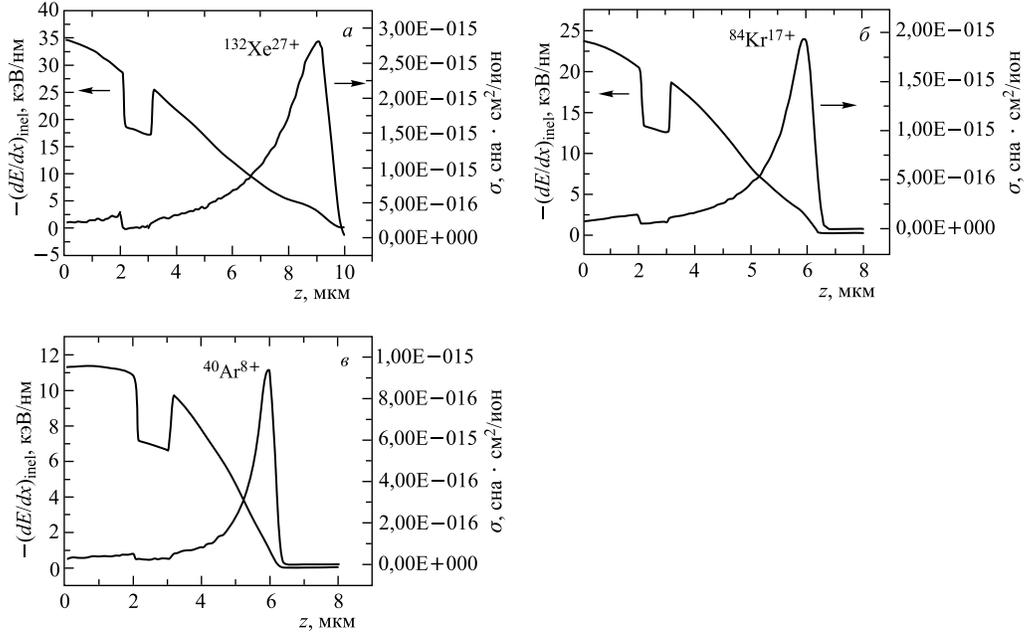


Рис. 1. Зависимость удельных ионизационных $S_{\text{inel}}(z)$ и упругих $S_{\text{el}}(z)$ потерь энергии от глубины z для ионов: а) $^{132}\text{Xe}^{27+}$ (167 МэВ); б) $^{84}\text{Kr}^{17+}$ (112 МэВ); в) $^{40}\text{Ar}^{8+}$ (48 МэВ)

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:

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

$$T_{e,i}^j(R_{\text{max}}, z, t) = T_{e,i}^j(r, Z_{\text{max}}, t) = T_{e,i}^m(R_{\text{max}}, z, t) = T_{e,i}^m(r, Z_{\text{max}}, t) = T_0. \quad (4б)$$

В выражениях (3), (4a), (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:

$$T_{e,i}^j(r, z = H_j - 0, t) = T_{e,i}^{j+1}(r, z = H_j + 0, t), \quad (5)$$

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

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

$$\lambda_{e,i}^j(T_{e,i}^j) \frac{\partial T_{e,i}^j(r, z = H_j - 0, t)}{\partial z} = \lambda_{e,i}^{j+1}(T_{e,i}^{j+1}) \frac{\partial T_{e,i}^{j+1}(r, z = H_j + 0, t)}{\partial z},$$

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

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/хастеллой

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

Теплопроводность: $\lambda_i \sim 4 \text{ Вт}/(\text{м} \cdot \text{К})$ [7].

Параметры электронной подсистемы для ВТСП:

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

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

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

Коэффициент электрон-фононного взаимодействия

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

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

Параметры теплоемкости решетки для ВТСП [6]

$T, \text{ К}$	$C_i, \text{ Дж}/(\text{кг} \cdot \text{К})$	$T, \text{ К}$	$C_i, \text{ Дж}/(\text{кг} \cdot \text{К})$	$T, \text{ К}$	$C_i, \text{ Дж}/(\text{кг} \cdot \text{К})$
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	—	—

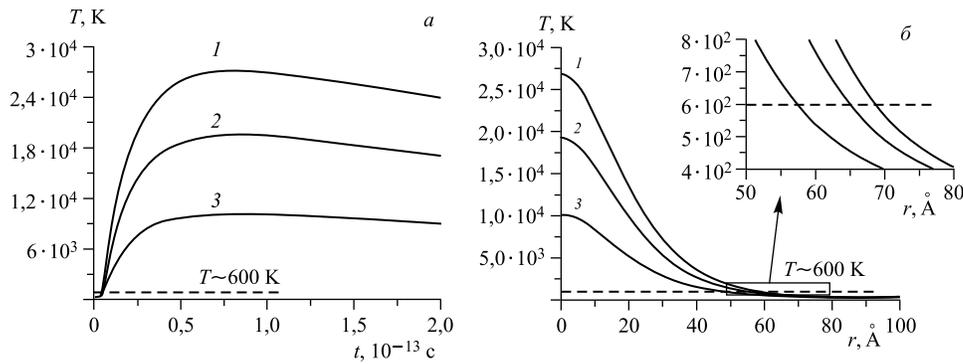


Рис. 2. Временная зависимость температуры решетки слоя ВТСП (глубина $z = 2,5$ мкм) (а) и радиальный профиль температуры слоя ВТСП (глубина $z = 2,5$ мкм) (б) при облучении различными ионами (1 — ксенон (167 МэВ); 2 — криптон (112 МэВ); 3 — аргон (48 МэВ)) в момент времени $t = 10^{-13}$ с; штриховой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

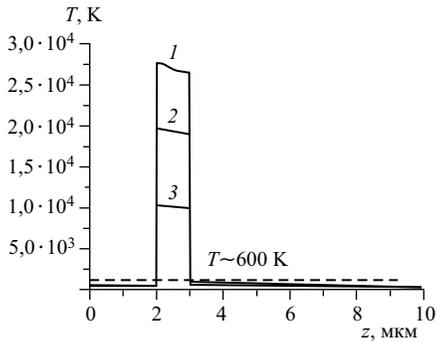


Рис. 3. Профиль температуры решетки по глубине трехслойной структуры Ag (2 мкм)/ВТСП (1 мкм)/хастеллой при облучении различными ионами (1 — ксенон (167 МэВ), 2 — криптон (112 МэВ), 3 — аргон (48 МэВ)) в момент времени $t = 10^{-13}$ с

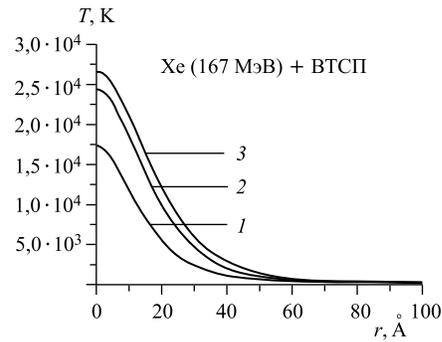


Рис. 4. Динамика роста температуры по радиальной зависимости (по r) слоя ВТСП при облучении ионами ксенона в различные моменты времени (1 — $2 \cdot 10^{-14}$ с, 2 — $4 \cdot 10^{-14}$ с, 3 — $6 \cdot 10^{-14}$ с)

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Проведены расчеты в модели термического пика применительно к многослойным наноструктурам типа лент ВТСП 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 опреде-

лены характерные размеры областей с локальными фазовыми переходами ($\sim 50\text{--}70$ нм). Характерные размеры локального разогрева ВТСП находятся в хорошем согласии с предельными критическими флюенсами облучения $5 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-2}$ для $^{132}\text{Xe}^{27+}$ и 10^{13} см^{-2} для $^{84}\text{Kr}^{17+}$, разрушающими сверхпроводимость в ВТСП, а также с диапазоном флюенсов, при которых наблюдается возрастание критического тока [8].

Для проверки представленных расчетов были проведены исследования образцов данной сверхпроводящей ленты методами сканирующей просвечивающей электронной микроскопии и просвечивающей электронной микроскопии высокого разрешения с целью обнаружения радиационных дефектов [9]. Изучались образцы, облученные ионами криптона с малыми флюенсами $10^{10}\text{--}10^{11} \text{ см}^{-2}$. Были обнаружены радиационные дефекты с размерами 3–5 нм, что совпадает с размерами магнитных вихрей Абрикосова. Такие дефекты могут служить центрами пиннинга, вследствие чего в сверхпроводнике увеличивается критический ток.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

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 фонных колебаний при прохождении тяжелых ионов высоких энергий через конденсированные среды в обобщенной модели термического пика // Материалы XIX Междунар. совещ. «Радиационная физика твердого тела», Севастополь, 31 авг. – 5 сент. 2009 г. М., 2009. С. 698–707.
4. Амирханов И. В. и др. Нелинейная модель термического пика в расчетах температурных эффектов в двухслойных структурах при облучении их тяжелыми ионами высокой энергии // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. 2009. № 12. С. 58–66.
5. Biersack J. P., Haggmark L. G. A Monte Carlo Computer Program for the Transport of Energetic Ions in Amorphous Targets // Nucl. Instr. Meth. B. 1980. V. 174. P. 257–269; <http://www.srim.org>.
6. Мацкевич Н. М., Стенин Ю. Г. Фазовые переходы в $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_x$ при температурах 300–900 К: термохимический и структурный аспекты // Журн. структурной химии. 2003. Т. 44, № 2. С. 255–260.
7. Кириченко Ю. А., Русанов К. В., Тюрина Е. Г. Теплопроводность высокотемпературных сверхпроводников (обзор экспериментальных данных) // Сверхпроводимость: физ. хим. тех. 1990. Т. 3, № 7. С. 1385–1409.
8. Антонова Л. Х. и др. Зависимость критических параметров ленты YBCO-123 от облучения тяжелыми ионами и электронами // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. 2011. № 5. С. 92–96.
9. Mikhailova G. et al. Radiation Resistance and Generation of Pinning Centers in Composite HTSC under Heavy Ions Irradiation // Phys. Stat. Sol. C. 2013 (in press); doi 10.1002/pssc.201200687.