

Автор:
 Язык: Фортран
 Среда программирования: Compaq Visual Fortran

Программа ТРИКЛ для численного решения системы линейных уравнений модели
 термического пика методом переменных направлений

Программа предназначена для исследования тепловых процессов в материалах при облучении тяжелыми ионами высоких энергий в рамках модели термического пика [1].

В качестве примера приводится исследование тепловых процессов в никеле при облучении ионами урана с энергией 700 МэВ.

Модель термического пика – это система уравнений теплопроводности для электронного газа и кристаллической решетки [2]:

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

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

Ось z направлена перпендикулярно облучаемой поверхности мишени, т.е. по направлению движения тяжелого иона. 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 $I_e(T_e)$, $I_i^\parallel(T_i)$ – 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 к поверхности. g – коэффициент, характеризующий взаимодействия электронной подсистемы с решеткой. $A_e(r, z, t)$ и $A_i(r, z, t)$ – источник энергии, вносимый налетающим ионом урана в электронную и решеточную подсистему соответственно, имеет следующий вид:

$$A_e(r, z, t) \equiv b_e S_{inel0} \exp\left[-\frac{(t-t_{e0})^2}{2s_{et}^2}\right] \exp\left(-\frac{r}{r_{e0}}\right) m_e(z),$$

$$A_i(r, z, t) \equiv b_i S_{phonon0} \exp\left[-\frac{(t-t_{i0})^2}{2s_{it}^2}\right] \exp\left(-\frac{r}{r_{i0}}\right) m_i(z),$$

где $S_{inel}(z) = S_{inel0} m_e(z)$ и $S_{phonon}(z) = S_{phonon0} m_i(z)$ – энергетические потери тяжелого иона на ионизацию и на возбуждение фононных колебаний (вычисляется программой SRIM-2008), $t_{e,i,0} \approx (1-5) \cdot 10^{-15} c$, $s_{e,i,t} = t_{e,i,0}$, $r_0 \approx 1$ нм [2].

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

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

здесь r_m – максимальный пробег d – электронов, зависящий от максимальной энергии e_m , передаваемой отдельному электрону.

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

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

$$\left. \frac{\partial T_{e,i}(r, z, t)}{\partial r} \right|_{r=0} = 0, \quad \left. \frac{\partial T_{e,i}(r, z, t)}{\partial z} \right|_{z=0} = 0, \quad T_{e,i}(R_{max}, z, t) = T_{e,i}(r, Z_{max}, t) = T_0. \quad (4)$$

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 $\Delta r, \Delta z$ и Δt – единицы измерения расстояния и времени.

Эти единицы выбраны в виде $\Delta t = a_1 t_0$ и $\Delta r = \Delta z = a_2 r_0$. Здесь a_1, a_2 – произвольные безразмерные константы. Значения этих констант положим равными: $a_1 = a_2 = 100$. Тогда систему уравнений (1), (2) в случае, если в кристалле нет анизотропии (т.е. $I_i^{\parallel} = I_i^{\perp} = I_i$), можно записать в виде (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 $k_{e,i} = I_{e,i}(T_0) a_1 t_0 / (C_{e,i}(T_0) (a_2 r_0)^2)$, $g_{e,i} = g(T_0) a_1 t_0 / C_{e,i}(T_0)$.

Начальные и граничные условия (3)-(4) тогда записываются в виде:

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

$$\left. \frac{\partial T_{e,i}(r, z, t)}{\partial r} \right|_{r=0} = 0, \quad \left. \frac{\partial T_{e,i}(r, z, t)}{\partial z} \right|_{z=0} = 0, \quad T_{e,i}(R_{max}, z, t) = T_{e,i}(r, Z_{max}, t) = 1. \quad (8)$$

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

$$A_{e,i}(r, z, t) = A_{0,e,i} \exp(-a_2 r) \exp(-a_1 (t - 0,05)^2 / 2) m_{e,i}(z),$$

здесь $A_{0,e,i} = b_{e,i} S_{inel0, phonon0} a_1 t_0 / (C_{e,i}(T_0) T_0)$.

Функция $m(z)$ вычисляется по программе SRIM-2003 в виде таблицы (рис.1.). При численном моделировании эту функцию предварительно сглаживаем и интерполируем кубическим сплайном (в программе это используется как входной файл muz.txt).

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

$$C_e(T_0) = 2,733 \cdot 10^{-2} \text{ Дж}/(\text{см}^3\text{К}), C_i(T_0) = 3,91 \text{ Дж}/(\text{см}^3\text{К}), g(T_0) = 4,05 \cdot 10^{12} \text{ Вт}/(\text{см}^3\text{К}),$$

$$I_e(T_0) = 4,1 \text{ Вт}/(\text{см К}), I_i(T_0) = 0,91 \text{ Вт}/(\text{см К}), S_{inel}(0) = 1,157 \cdot 10^{-7} \text{ Дж}/\text{см},$$

$$S_{phonon}(0) = 1,635 \cdot 10^{-10} \text{ Дж}/\text{см}.$$

Для приведенных величин безразмерные коэффициенты $k_e, k_i, g_e, g_i, A_{0,e}, A_{0,i}, R_{\max}, Z_{\max}$ принимают значения: $k_e \approx 0,15; k_i \approx 2,33 \cdot 10^{-4}; g_e \approx 14,82; g_i \approx 0,1036; A_{0,e} \approx 8,97 \cdot 10^6; A_{0,i} \approx 88,51; R_{\max} = 0,5; Z_{\max} = 200$ и они в программе записаны в блоке данных. Таким образом, для численного решения системы уравнений (5), (6) с начальными и граничными условиями (7), (8) все параметры известны.

Математическая постановка задачи и разностные схемы для численного решения системы уравнений модели термического пика описаны в [2,3].

Программа написана на языке fortran в среде программирования Compaq Visual Fortran. В качестве примера приводится программа для вычисления временной зависимости температур электронного газа и решетки в никеле при облучении ионами урана с энергией 700 МэВ. Для получения различных решений можно добавить код в блоке «copy results» и «save results».

1. Пример фрагмента блока «copy results» и «save results» для сохранения результатов по времени в разных глубинах по z:

```
!copy results-----
!sokhraneniye rezltatov po vremeni v raznix glubinakh z=0,2,4 mkm
TUR(0,K)=U0(0,0)          ! U0(0,0)          z=0
TUR(1,K)=U0(0,50)        ! U0(0,50)         z=2 mkm
TUR(2,K)=U0(0,100)       ! U0(0,100)        z=4 mkm
TVR(0,K)=V0(0,0)          ! V0(0,0)          z=0
TVR(1,K)=V0(0,50)        ! U0(0,50)         z=2 mkm
TVR(2,K)=V0(0,100)       ! U0(0,100)        z=4 mkm
!-----
.
.
.
!save results-----
! v fayle tur.txt temperatura elektronov v Kelvinakh
```

```

! v fayle tvr.txt temperatura reshetki v Kelvinahk
OPEN(UNIT=4,FILE='TUR.TXT')
DO K=0,KK
WRITE(4,'(4E24.15)') HT*DFLOAT(K)*t_0,(300.d0*(TUR(I,K)+1.d0),I=0,2)
END DO
CLOSE(4)

OPEN(UNIT=5,FILE='TVR.TXT')
DO K=0,KK
WRITE(5,'(4E24.15)') HT*DFLOAT(K)*t_0,(300.d0*(TVR(I,K)+1.d0),I=0,2)
END DO
CLOSE(5)
!-----

```

2. Пример фрагмента блока «copy results» и «save results» для сохранения результатов по времени в разных глубинах по r:

```

!copy results-----
!sokhraneniye rezltatov po vremeni v raznix glubinakh r-5,10 nm
TUR(3,K)=U0(10,0)      ! U0(10,0)      z=5 nm
TUR(4,K)=U0(20,0)     ! U0(20,0)     z=10 nm
TVR(3,K)=V0(10,0)     ! U0(10,0)     z=5 nm
TVR(4,K)=V0(20,0)     ! U0(20,0)     z=10 nm
!-----
.
.
.
!save results-----
! v fayle tur_1.txt temperatura elektronov v Kelvinahk
! v fayle tvr_1.txt temperatura reshetki v Kelvinahk
OPEN(UNIT=41,FILE='TUR_1.TXT')
DO K=0,KK
WRITE(41,'(3E24.15)') HT*DFLOAT(K)*t_0,(300.d0*(TUR(I,K)+1.d0),I=3,4)
END DO
CLOSE(41)

OPEN(UNIT=51,FILE='TVR_1.TXT')
DO K=0,KK
WRITE(51,'(3E24.15)') HT*DFLOAT(K)*t_0,(300.d0*(TVR(I,K)+1.d0),I=3,4)
END DO
CLOSE(51)
!-----

```

Литература:

1. Лифшиц И.М., Каганов М.И., Танатаров Л.В. К теории релаксационных изменений в металлах // Атомная энергия. 1959, т.6, с.391-402.
2. Амирханов И.В., Дидык А.Ю., Шарипов З.А. и др. Численное исследование температурных эффектов в материалах при облучении их тяжелыми ионами высоких энергий в рамках уравнений теплопроводности для электронов и решетки // Письма в ЭЧАЯ, 2006, т.3, №1(130), стр.63-75.
3. Амирханов И.В., Пузынин И.В., Пузынина Т.П., Шарипов З.А. Математическое моделирование тепловых процессов в материалах при облучении тяжелыми ионами

высоких энергий // Вестник ТвГУ. Серия: Прикладная математика, 2009, вып.1(12),
№8, стр. 17-27.