

**ОБЪЕДИНЕННЫЙ ИНСТИТУТ ЯДЕРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ**

11-2005-142

На правах рукописи

УДК 519.6, 517.9

533.9, 539.18

**ПРИБИШ Ян**

**МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ  
ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНОЙ РЕЛАКСАЦИИ  
В ЭЛЕКТРОННО-АТОМНЫХ СИСТЕМАХ**

**Специальность: 05.13.18 — математическое моделирование,  
численные методы и комплексы программ**

**Автореферат диссертации на соискание ученой степени  
кандидата физико-математических наук**

Дубна 2005

Работа выполнена в Лаборатории информационных технологий  
Объединенного института ядерных исследований

Научные руководители:

кандидат физико-математических наук  
кандидат физико-математических наук

Э.А. Айрян  
Б.Ф. Костенко

Официальные оппоненты:

доктор физико-математических наук, профессор  
кандидат физико-математических наук

Л.А. Севастьянов  
А.Е. Волков

Ведущая организация:

Тверской государственный университет

Защита состоится " \_\_\_\_ " \_\_\_\_\_ 2005 г. в " \_\_\_\_ " на заседании диссертационного совета Д. 720.001.04 в Объединенном институте ядерных исследований (Лаборатория информационных технологий), г. Дубна Московской области.

С диссертацией можно ознакомиться в научной библиотеке  
Объединенного института ядерных исследований

Автореферат разослан " \_\_\_\_ " \_\_\_\_\_ 2005 г.

Ученый секретарь диссертационного совета  
кандидат физико-математических наук,



З.М. Иванченко

## *Общая характеристика диссертации*

### **Актуальность темы**

За последние двадцать лет диапазон технологических применений ускоренных ионов существенно расширился. В этой связи можно упомянуть направленную модификацию физико-механических и химических свойств материалов, улучшение свойств высокотемпературных сверхпроводников путем создания в них дефектов, новые методы управляемого термоядерного синтеза и др. Хотя многие особенности этих процессов уже ясны, достаточно подробные математические модели, описывающие такие взаимодействия в широком диапазоне параметров, пока отсутствуют. Поэтому разработка моделей и программ расчета взаимодействий ускоренных ионов с конденсированными средами, позволяющих контролировать протекание вышеупомянутых процессов, приобретает сейчас особую актуальность.

Существенная часть проблемы сводится к построению реалистичных моделей источников энерговыделения, поиску уравнений, описывающих тепловую релаксацию выделившейся энергии, и нахождению соответствующих физических параметров модели. Кроме того, в виду того, что сформулированную задачу практически никогда не удастся решить аналитически, второй этап исследований нуждается в разработке эффективных вычислительных схем и алгоритмов и проведении достаточно трудоемких численных экспериментов.

**Целью работы** является развитие методов математического моделирования взаимодействий ускоренных ионов с веществом, разработка эффективных алгоритмов и программ для численного решения систем нелинейных дифференциальных уравнений в частных производных для описания процессов высокотемпературной релаксации, сопровождающей эти взаимодействия, построение математических моделей ряда актуальных с практической точки зрения процессов таких, как взаимодействие интенсивных ионных пучков с тонкими образцами, формирование треков в высокотемпературных сверхпроводниках, процессов схлопывания кавитационного пузырька в дейтерированном ацетоне.

### **Научная новизна**

На основе нелинейных дифференциальных уравнений в частных производных предложена математическая модель для описания процессов тепловой релаксации с учетом плавления в условиях мощного энерговыделения, не опи-

сывающихся в рамках традиционной постановки задачи Стефана. Разработан новый комплекс алгоритмов и программ для исследования процессов трекообразования в высокотемпературных сверхпроводниках. Выполненные численные эксперименты впервые показали с большой степенью достоверности, что механизм температурного пика является ответственным за процессы трекообразования в иттриевых высокотемпературных сверхпроводниках. Разработана программа расчета термоупругой релаксации в образцах, подвергшихся облучению мощным пучком ионов, отвечающим источникам со взрывной ионной эмиссией. Численные эксперименты, выполненные в рамках используемой модели, показали, что механические напряжения, возникающие вследствие теплового расширения вещества, не являются ответственными за модификацию образца. Предложена модель высокотемпературной электрон-ионной релаксации в плазме, образующейся при схлопывании кавитационного пузырька в дейтерированном ацетоне, и разработан программный комплекс для нахождения неизвестных физических параметров модели. Расчет времени электрон-ионной релаксации подтвердил гипотезу существования перегрева ионной компоненты, принципиально важную с точки зрения возможности осуществления реакций термоядерного синтеза в процессах схлопывания кавитационного пузырька в дейтерированном ацетоне.

### **Практическая ценность**

Программы были использованы для описания экспериментальных данных по трекообразованию, полученных в нескольких ускорительных центрах (ОИЯИ, GANIL и др.), для объяснения процессов обработки поверхностей материалов интенсивными ионными пучками (ОИЯИ, ЛВЭ) и для объяснения выхода продуктов ядерных реакций в кавитационных пузырьках в дейтерированном ацетоне (эксперимент в Окридже, США).

### **Апробация работы**

Основные результаты диссертации докладывались на семинарах ЛИТ ОИЯИ, Дубна, были представлены и докладывались на международных конференциях: "International Scientific Conference on Mathematics", (г. Херляны, Словакия, 2000); "European Network on Ion Track Technology", CIRIL-GANIL, (г. Каэн, Франция, 2002); "7th international Scientific Conference"(г. Кошице, Словакия, 2002); "The First International Congress on Mathematical Modelling", (г. Дубна, 2002); "V Международный уральский семинар по радиационной фи-

зике металлов и сплавов", (г. Снежинск, 2003); "XVI Всероссийская конференция по проблемам математики, информатики, физики и химии"(г. Москва, 2005).

### Публикации и Личный вклад автора

По результатам диссертации опубликовано двенадцать работ. Результаты, выносимые на защиту, получены лично автором. В работах, опубликованных в соавторстве, личный вклад автора был определяющим на всех этапах выполнения данных работ.

### Объем и структура диссертации

Диссертация состоит из введения, трех глав, заключения и приложения. Список литературы содержит 98 наименований. Полный объем диссертации – 109 страниц машинописного текста, включая четыре таблицы и тридцать восемь рисунков.

### *Содержание работы*

Во введении приводится полный обзор литературы по вопросам, рассматриваемым в диссертации, обоснована актуальность работы и сформулированы цели диссертации. Коротко описаны задачи, возникающие при исследовании процессов высокотемпературной релаксации в электронно–атомных системах, изложено ее содержание.

В работе рассматривается ряд современных применений системы нелинейных дифференциальных уравнений в частных производных вида

$$\rho \frac{DE_e}{Dt} = -P_e \nabla \cdot \mathbf{v} + \nabla \cdot (K_e \nabla T_e) \pm g \cdot (T_e - T_i) + q_e(r, t), \quad (1)$$

$$\rho \frac{DE_i}{Dt} = -P_i \nabla \cdot \mathbf{v} + \nabla \cdot (K_i \nabla T_i) \mp g \cdot (T_e - T_i) + q_i(r, t), \quad (2)$$

где  $\rho$ ,  $\mathbf{v}$ ,  $P$ ,  $E$ ,  $T$ ,  $K$  – плотность, скорость, давление, энергия, температура и теплопроводность, электронной ( $e$ ) и ионной ( $i$ ) подсистем,  $g$  – постоянная электрон–атомного взаимодействия,  $q(r, t)$  внешний источник мощности,  $\frac{D}{Dt} \equiv \frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla$  – полная производная. Граничные и начальные условия формулируются в контексте конкретных задач.

В первой главе диссертации предпринята попытка построения реалистической модели термоупругих процессов в материалах, испытывающих интенсивную ионную бомбардировку. С этой целью развита модель пространственно–

временной динамики энерговыделения в тонких пленках, отвечающая имеющимся источникам со взрывной ионной эмиссией, а также произведены расчеты последующих процессов термоупругой релаксации. В результате анализа используемой математической модели получен важный вывод о невозможности постановки соответствующей задачи Стефана для описания движения границы раздела твердой и жидкой фаз (не смотря на ее повсеместное использование в подобных расчетах). Предложен другой, адекватный рассматриваемой задаче метод решения, который затем используется существенно во второй главе диссертации при моделировании процессов трекообразования в высокотемпературных сверхпроводниках.

В первом параграфе с целью изучения явлений формирования волн сжатия была сформулирована модель, описывающая совместную эволюцию термоупругих напряжений и температур в образце, на базе следующей системы уравнений с начальными и граничными условиями:

$$\frac{\partial^2 \sigma}{\partial t^2} = A_1 \frac{\partial^2 \sigma}{\partial x^2} - A_2 \frac{\partial^2 T}{\partial t^2}, \quad \sigma(x, 0) = \frac{\partial \sigma(x, 0)}{\partial t} = 0, \quad (3)$$

$$(1 + A_4 T) \frac{\partial T}{\partial t} = A \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} - A_3 T \frac{\partial \sigma}{\partial t} + q, \quad (4)$$

$$\sigma(0, t) = \sigma(1, t) = 0, \quad T(x, 0) = 1, \quad \frac{\partial T(0, t)}{\partial x} = \frac{\partial T(1, t)}{\partial x} = 0.$$

В уравнениях (3) – (4) все величины даны в безразмерном виде. Безразмерные величины можно выразить через физические постоянные параметры по формулам:

$$A = \frac{\lambda_0 \tau}{c_0 \rho_0 l_0^2}, \quad A_1 = \frac{E \tau^2}{\rho_0 l_0^2}, \quad A_2 = \frac{E \alpha_T T_0}{\sigma_0}, \quad A_3 = \frac{\alpha_T \sigma_0}{c_0 \rho_0}, \quad A_4 = \frac{E \alpha_T^2 T_0}{c_0 \rho_0},$$

где  $\lambda_0$  – теплопроводность металла,  $c_0$  – удельная теплоемкость,  $\rho_0$  – плотность,  $E$  – модуль Юнга,  $\alpha_T$  – коэффициент объемного расширения. Функции  $T \equiv T(x, t)$ ,  $\sigma \equiv \sigma(x, t)$  описывают температуру образца и напряжение,  $q \equiv q(x, t)$  – мощность теплового источника.

В первом пункте первого параграфа сформулирована модель энерговыделения ионов с учетом конкретных особенностей импульсных источников ионов со взрывной эмиссией, а также точной пространственно – временной картины энергетических потерь пучка ионов в веществе.

Зависимость от времени интенсивности падающего пучка в некотором приближении (передающем, по меньшей мере, ее качественное поведение) можно аппроксимировать формулой

$$I(t) = I_0 \frac{1 - e^{-t/\tau_1}}{1 + e^{(t-\tau_1-\Delta t)/\tau_2}} \equiv I_0 f(t),$$

где  $\tau_1, \tau_2 \sim (1 - 5) \cdot 10^{-8}$  с – длительности нарастания и спадания импульса,  $\Delta t$  – его длительность. Аналогичным образом описывается и мощность,  $P = I(t)U$ , попадающая на поверхность образца:  $P = P_0 f(t)$ , где  $U$  – ускоряющее напряжение. Здесь предполагается выполненным следующее очевидное условие самосогласованности:

$$P_0 \int_0^\infty f(t) dt = Q_0,$$

для указанных интервалов значений плотности выделившейся мощности  $P_0$  и плотности выделившейся энергии  $Q_0$ .

Для расчета динамики энерговыделения пучка внутри образца были использованы данные по тормозным способностям ионов в различных веществах. В интересующем нас диапазоне энергий тормозные способности хорошо аппроксимируются формулой

$$-\frac{dE}{dx} = a E^{1/2}. \quad (5)$$

В частности, для ионов углерода, сталкивающихся с железным образцом, в системе единиц  $[E] = \text{кэВ}$ ,  $[x] = \text{м}$ , следует взять  $a = 5,82 \cdot 10^7$ . Рассматривая соотношение (5) как уравнение, описывающее зависимость энергии налетающего иона с начальной энергией  $E_0$  от пройденного пути, находим

$$E(x) = (E_0^{1/2} - \frac{a}{2}x)^2.$$

Время прихода иона в точку, отстоящую от поверхности на расстоянии  $x$ , равно

$$\tau(x) = \int_0^x \frac{dx}{v(x)} = \frac{1}{b} \int_0^x \frac{dx}{E_0^{1/2} - ax/2} = -\frac{2}{ab} \ln(1 - x/R(E_0)), \quad 0 \leq x < R(E_0),$$

где символом  $R(E_0)$  обозначен пробег иона в веществе:

$$R(E_0) = \int_0^{E_0} \frac{dE}{(-dE/dx)} = \frac{2}{a} E_0^{1/2},$$

а коэффициент  $b$  для ионов в Fe равен  $b = 1,22 \cdot 10^5$ , если  $[v] = \text{м/с}$ . Распределение по времени выделяющейся мощности внутри образца с учетом времени движения иона до точки  $x$  можно теперь представить в виде

$$P(x, t) = \frac{2P_0}{R(E_0)} (1 - x/R(E_0)) f(t - \tau(x)) \Theta(t - \tau(x)). \quad (6)$$

Во втором пункте приводится метод численного решения. Система (3) – (4) решалась на прямоугольной сетке переменных  $x$  и  $t$  с шагами  $h_x$  и  $\tau_t$  в интервале  $x \in [0, 1]$ ,  $t \in [0, t_{max}]$ . Длина  $x$  нормировалась на толщину железной мишени  $l_0$ , а время  $t$  – на длительность импульса  $\tau = 3 \cdot 10^{-7}$  с.

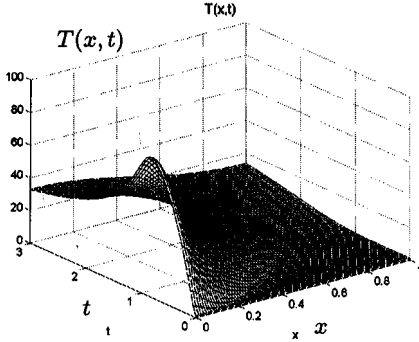


Рис. 1: Пространственно-временное распределение температуры в образце (в безразмерных единицах).

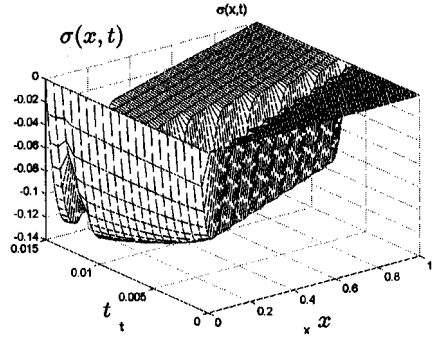


Рис. 2: Пространственно-временное распределение напряжения в интервале времени от 0 до  $10^{-8}$  с.

Для решения системы применялась следующая конечно-разностная схема с весами  $\gamma_1, \gamma_2 \in [0, 1]$ :

$$\frac{\sigma_i^{k+1} - 2\sigma_i^k + \sigma_i^{k-1}}{\tau_i^2} = A_1 \left[ \gamma_1 \frac{\sigma_{i+1}^{k+1} - 2\sigma_i^{k+1} + \sigma_{i-1}^{k+1}}{h_x^2} + (1 - 2\gamma_1) \frac{\sigma_{i+1}^k - 2\sigma_i^k + \sigma_{i-1}^k}{h_x^2} + \right. \\ \left. + \gamma_1 \frac{\sigma_{i+1}^{k-1} - 2\sigma_i^{k-1} + \sigma_{i-1}^{k-1}}{h_x^2} \right] - A_2 \frac{T_i^{k+1} - 2T_i^k + T_i^{k-1}}{\tau_i^2} \quad (7)$$

$$(1 + A_4 T_i^k) \frac{T_i^{k+1} - T_i^k}{\tau_i} = A \left[ \gamma_2 \frac{T_{i+1}^{k+1} - 2T_i^{k+1} + T_{i-1}^{k+1}}{h_x^2} + (1 - \gamma_2) \frac{T_{i+1}^k - 2T_i^k + T_{i-1}^k}{h_x^2} \right] - \\ - A_3 T_i^k \frac{\sigma_i^{k+1} - \sigma_i^k}{\tau_i} + q_i^{k+1/2}, \quad (8)$$

где  $\sigma_i^k = \sigma(x_i, t_k)$ ,  $T_i^k = T(x_i, t_k)$  и  $q_i^{k+1/2} = q(x_i, t_k + \tau_i/2)$ .

В третьем пункте приведены результаты численных расчетов. На рис. 1 показано распределение температуры в металлическом образце толщиной  $10^{-5}$  см вплоть до момента времени  $9 \cdot 10^{-7}$  с при энергии частиц падающего пучка 300 кэВ. На рис. 2 приведено распределение напряжения в образце при той же энергии. Отчетливо видна волна разрежения, сформировавшаяся в результате отражения волны сжатия от задней поверхности.

Выполненные в данном разделе расчеты показывают, что максимальные механические напряжения, возникающие вследствие теплового расширения вещества, не превышают ни предел текучести железа, ни его временное сопротивление разрыву. Таким образом появляется необходимость учета в облучаемом



образце фазовых переходов, которые становятся возможными при увеличении интенсивности пучка ионов и которые по существующим представлениям могут приводить к образованию ударных волн, ответственных за модификацию образца.

Во втором параграфе приведены результаты моделирования фазовых переходов в тонких образцах облучаемых ионными пучками. Как известно, описание фазовых переходов типа плавления – затвердевания, испарения – конденсации приводит к задаче Стефана. Соответствующие математические модели характеризуются наличием подвижной, заранее неизвестной границы  $S$  фазового перехода. В соответствии с этим подходом на границе фазового раздела принимается следующее условие

$$K_{sol} \frac{\partial T(x_S + 0, t)}{\partial x} - K_{liq} \frac{\partial T(x_S - 0, t)}{\partial x} = L \rho_{sol} V_S. \quad (9)$$

Здесь  $V_S = d\xi_S/dt$  – скорость движения границы  $S$ ,  $K_{sol}$  и  $K_{liq}$  – коэффициенты теплопроводности материала для твердой и жидкой фаз,  $L$  и  $\rho_{sol}$  – удельная теплота плавления (или энтальпия фазового перехода) и плотность соответственно. Полная математическая формулировка задачи Стефана включает, кроме (9), условие, учитывающее тот факт, что фазовый переход происходит при постоянной температуре,

$$T|_S = T^*, \quad (10)$$

где  $T^*$  – температура плавления, а также – закон сохранения энергии:

$$\rho C \frac{\partial T}{\partial t} = -\text{div } j + q(\mathbf{x}, t).$$

$q(\mathbf{x}, t)$  описывает мощность внешнего источника тепла, а  $C$  – коэффициент теплоемкости.

Обычно соотношения (9) – (10) используются в численных алгоритмах в явном виде. С точки зрения построения эффективных вычислительных алгоритмов важно, что задача Стефана допускает обобщенную формулировку, при которой условия (9) и (10) включаются непосредственно в уравнение сохранения энергии:

$$(\rho C + L \delta(T - T^*)) \left( \frac{\partial T}{\partial t} + \mathbf{v} \text{ grad } T \right) = \text{div}(K \text{ grad } T) + q(\mathbf{x}, t), \quad (11)$$

где  $L \delta(T - T^*) \partial T / \partial t$  дополнительный вклад в теплоемкость тепла, израсходованного на фазовый переход,  $\mathbf{v} \text{ grad } T$  учитывает возможное температурное изменение, обусловленное конвекцией (в задачах, рассматриваемых в данной главе, не возникает необходимости учитывать этот член). Таким образом, главная

идея этого подхода сводится к предложению учета удельной теплоты плавления  $L$  в качестве дополнительной компоненты теплоемкости  $\rho C$ , которая, однако, дает вклад только в точке фазового перехода, когда  $T = T^*$ . Но даже в этом подходе уравнение (11) обычно считается только следствием условия (9).

В первом пункте показано, что на самом деле условие (11) дает правильное описание фазовых переходов даже в том случае, когда соотношения (9) и (10) не применимы.

Во втором пункте рассмотрены фазовые переходы в присутствии мощных источников энергии. В частности, изучалось уравнение теплопроводности

$$\rho(T)c(T)\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left( k(T)\frac{\partial T}{\partial x} \right) + q \quad (12)$$

с начальными и граничными условиями  $T(x, 0) = T_0$ ,  $\frac{\partial T(0,t)}{\partial x} = \frac{\partial T(l_0,t)}{\partial x} = 0$ . Численный эксперимент проводился на мишени из железа. Временная и пространственная зависимость мощности источника (в безразмерных единицах) была взята в виде:

$$q(x, t) = Q q_1(x)q_2(t), \quad \text{где} \quad q_i(z) = \frac{1}{1 + \exp \mu_i(z - z_i)}.$$

Здесь  $Q$  описывает полную энергию источника,  $Q = 59,44$ ,  $x_1 = 0,07$ ,  $t_1 = 1$ ,  $\mu_i = 100$ . Небольшое различие между физическими параметрами для твердой и жидкой фазы в (12) не учитывалось в виду его несущественности для целей данного исследования.

Уравнение (12) решалось численно на прямоугольной пространственно-временной сетке переменных  $x$  и  $t$  с постоянными шагами  $h_x$  и  $h_t$  соответственно. Для решения применялась конечно-разностная схема с весами для уравнений параболического типа:

$$e_j^k \frac{T_j^{k+1} - T_j^k}{h_t} = k_0 \left[ \gamma \frac{T_{j+1}^{k+1} - 2T_j^{k+1} + T_{j-1}^{k+1}}{h_x^2} + (1 - \gamma) \frac{T_{j+1}^k - 2T_j^k + T_{j-1}^k}{h_x^2} \right] + q_j^{k+\frac{1}{2}}, \quad (13)$$

где

$$\gamma \in [0, 1], \quad T_j^k = T(x_j, t_k), \quad e_j^k = \rho(T_j^k)c(T_j^k), \quad q_j^{k+\frac{1}{2}} = q(x_j, t_k + \frac{h_t}{2}),$$

На рис. 3 отчетливо видно формирование "плато", высота которого соответствует температуре плавления, для пространственного распределения температуры. Узкая полоса, ограниченная двумя разрывными линиями на рис. 3 и 4, отвечает ширине сглаживания  $\delta$ -функции, введенного при численном решении уравнения (11). Наличие двух скачков пространственной производной температуры несколько замаскировано именно этой размазкой  $\delta$ -функции. Рис. 3 демонстрирует временную зависимость температуры на двух разных глубинах

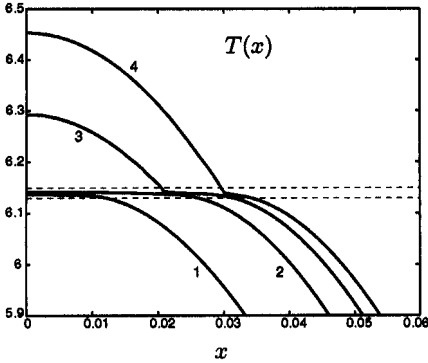


Рис. 3: Зависимость температуры от  $x$  в моменты времени: 1)  $t = 0, 16$ ; 2)  $t = 0, 18$ ; 3)  $t = 0, 20$ ; 4)  $t = 0, 21$  ( $\Delta = 0, 01$ ).

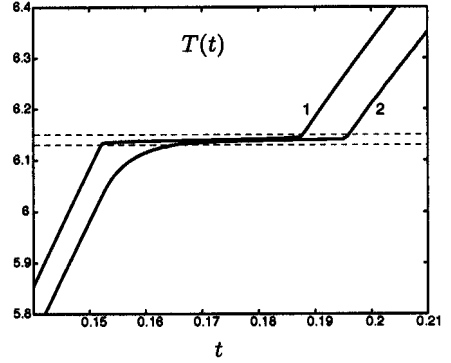


Рис. 4: Зависимость температуры от  $t$  на глубинах: 1)  $x = 0$ ; 2)  $x = 0, 04$  ( $\Delta = 0, 01$ ).

образца. Очевидно, что такое поведение температуры существенно отличается от традиционного описания фазового перехода в рамках классической задачи Стефана (9) и (10).

Во второй главе исследуется процесс формирования треков в высокотемпературных сверхпроводниках на основе модели температурного пика (МТП). Модель, используемая в этой работе, построена по аналогии с МТП развитой в Каэне (Франция), однако все основные предположения МТП обсуждаются здесь гораздо более детально, чем это было сделано ранее, причем как с физической, так и математической точек зрения. Дополнительно учтена зависимость скорости электрон-атомной релаксации от температуры электронов, а также предлагается более точное описание процесса энерговыделения. Невозможность описания процесса трекообразования в рамках традиционной постановки задачи Стефана потребовала разработки и тщательного тестирования новых методов численного решения уравнений модели.

В первом параграфе приведена постановка задачи. Тепловые потоки в электронной и атомной подсистемах в рамках модели температурного пика описываются с помощью следующей системы связанных нелинейных дифференциальных уравнений:

$$\rho C_e(T_e) \frac{\partial T_e}{\partial t} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[ r K_e(T_e) \frac{\partial T_e}{\partial r} \right] - g \cdot (T_e - T_i) + q(r, t), \quad (14)$$

$$\rho C_i(T_i) \frac{\partial T_i}{\partial t} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[ r K_i(T_i) \frac{\partial T_i}{\partial r} \right] + g \cdot (T_e - T_i), \quad (15)$$

где  $r$  радиус в цилиндрических координатах,  $T_e$  и  $T_i$  – температура электронов и решетки,  $C_{e,i}$  и  $K_{e,i}$  – теплоемкость и теплопроводность электронной и атомной подсистемы,  $g$  – постоянная электронно–атомного взаимодействия,  $q(r, t)$  – источник мощности электронной подсистемы.

Столкновения налетающего иона с атомными ядрами, приводящие к прямому выбиванию атомов из своих положений в кристаллической решетке, в уравнениях (14), (15) не учитываются. Это связано с тем, что потери энергии, вызванные такими столкновениями (вероятность которых описывается формулой Резерфорда), на два порядка меньше, чем потери из-за электронных возбуждений.

Уравнения (14), (15) не учитывают  $z$  зависимость  $T_e$  и  $T_i$ , так как изменения потерь энергии иона по  $z$  малы. Это видно, например, из того, что величина пробега иона в веществе до его полной остановки существенно превышает радиус трека. Это обстоятельство позволяет ограничиться рассмотрением задачи в двумерном пространстве, а учет радиальной симметрии, имеющей место тогда, когда облучение ведется перпендикулярно плоскости (001) кристалла  $YBa_2Cu_3O_{7-x}$ , сводит задачу к одномерному случаю в цилиндрической системе координат.

Основные уравнения модели (14) – (15) фактически представляют собой закон сохранения энергии, записанный по отдельности для электронов и атомов. В (14) энергия, получаемая электронами при прохождении иона через вещество, учтена с помощью внешнего источника  $q(r, t)$ . Атомы, в свою очередь, согласно (15), нагреваются от более горячих электронов за счет электронно–атомного взаимодействия, представленного слагаемым  $g \cdot (T_e - T_i)$ . Соответствующие потери энергии электронами учтены в (14) с помощью такого же члена, взятого с обратным знаком.

Начальные и граничные условия были взяты в виде:

$$T_e(r, 0) = T_i(r, 0) = T_0,$$

$$\left(\frac{\partial T_e}{\partial r}\right)_{r=r_{min}} = \left(\frac{\partial T_i}{\partial r}\right)_{r=r_{min}} = 0, \quad T_e(r_{max}, t) = T_i(r_{max}, t) = T_0,$$

где  $T_0$  температура окружающей среды, параметр обрезания  $r_{min} = 0,1$  нм вводим из-за сложности вычисления источника электронной подсистемы в точке  $r = 0$  (да и само понятие температуры на масштабах, меньших размеров атома, в рамках рассматриваемой модели не вполне корректно). Параметр  $r_{max} = 100,1$  нм взят в качестве физической бесконечности. Численные экс-

перименты показали, что его дальнейшее увеличение не влияет на расчетную величину радиуса трека.

Во втором параграфе описана дельта-электронная модель энерговыделения. Ее дальнейшее развитие было выполнено в направлении учета временной динамики процесса диссипации энергии, запасенной в  $\delta$ -электронах. Время, за которое электрон достигает точку на расстоянии  $b$  от центра траектории иона, равно

$$t(b) = \int_0^b \frac{db}{v(b)} = \int_{R-b}^R \frac{dr}{v(R-r)} = \frac{1}{c} \int_{E(R-b)}^{E(R)} dE \left( \frac{dr}{dE} \right) \frac{E + m_e c^2}{[E(E + 2m_e c^2)]^{1/2}}, \quad (16)$$

где  $R = b + r$  ( $r$  – остаточный пробег  $\delta$ -электрона с энергией  $E$  в точке  $b$ ),  $r = r(E)$  соотношение пробег-энергия для электронов в материале. Плотность энергии выделившейся в момент времени  $t$  в объеме ( $2\pi b db \times$  единица длины) определяется формулой

$$\varepsilon(b, t) = \frac{1}{2\pi b} \int_{E(b,t)}^{E_{max}} \left( -\frac{dE(R-b)}{db} \right) \frac{dN}{dE} dE,$$

где  $E(b, t)$  – решение уравнения (16),  $dN/dE$  – число  $\delta$ -электронов на единицу энергии, рассчитанное с помощью формулы Резерфорда. Зависимость пробега от энергии  $r(E)$ , а также обратная зависимость  $E(r)$  были получены путем аппроксимации известных экспериментальных и теоретических данных.

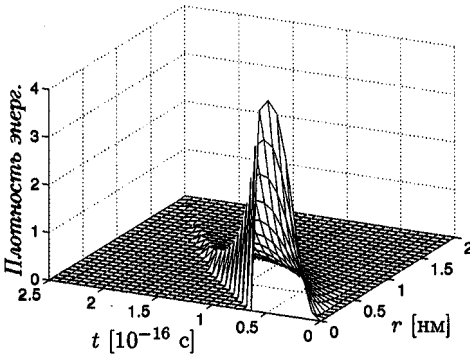


Рис. 5: Плотность энерговыделения  $q(r, t)$  в электронной подсистеме.

На рис. 5 приведена плотность энерговыделения в электронной подсистеме  $YBa_2Cu_3O_{7-x}$  ионом  $^{129}Xe(2,6 \text{ МэВ/нуклон})$ . Около 80% полной энергии  $dE/dx$  выделяется к моменту времени  $10^{-16}$  с, причем большая ее часть в области  $r < 1$  нм при  $t < 0,15$  фс, хотя процесс энерговыделения продолжается вплоть до  $t \sim 10^{-5}$  с и  $r \sim 10^{-3}$  см.

Тормозная способность, рассчитанная в рамках данной модели как радиальный интеграл от распределения дозы, находится в соответствии со значениями, найденными по программе SRIM 2003 в пределах 12% точности. Хотя такая несогласованность отражает реальные возможности теории, существующей в этой области, радиальное

распределение энерговыведения было перенормировано к значениям SRIM, которые обычно принимаются в качестве эталона.

В третьем параграфе приводится описание электронной системы. Как уже упоминалось выше, основные уравнения модели (14) – (15) являются законами сохранения энергии. Они допускают, как квантовую, так и классическую интерпретацию, фактически содержащуюся в теплофизических константах, в частности – теплоемкости и теплопроводности электронной и атомной подсистем. Теплоемкость электронов в широком температурном интервале может быть найдена численным методом по формуле

$$\rho C_e(T_e) = \int \varepsilon \frac{f(\varepsilon, T_e)}{dT_e} dn(\varepsilon),$$

где  $f(\varepsilon, T_e)$  – распределение Ферми,  $dn(\varepsilon) = \eta(\varepsilon) d\varepsilon$ , and  $\eta(\varepsilon)$  – плотность уровней электронов в  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$ . Таким образом полученное значение параметра Зоммерфельда,  $\gamma = \rho C_e/T_e$ , с учетом имеющихся экспериментальных данных для плотности электронных уровней, равно  $2,4 \pm 0,8 \cdot 10^{-4}$  Дж/(см<sup>3</sup>·К<sup>2</sup>).

Зависимость параметров рассматриваемой модели от температуры электронов можно учесть, если принять во внимание теорию Аллена и экспериментальные данные по времени электронно–атомной релаксации в  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$ . В самом деле, теплопроводность электронов связана с параметром теплопроводности по формуле

$$K_e = D_e \rho C_e, \quad \text{где} \quad \rho C_e = \gamma T_e, \quad \gamma \approx 2,4 \cdot 10^{-4} \text{ Дж/см}^3\text{К}^2.$$

Эффективное время электронно–атомной релаксации  $\tau$  равно

$$\tau = \rho C_e/g.$$

Поскольку  $C_e$  является линейной функцией от  $T_e$ , функция  $\tau(T_e)$  имеет в рассматриваемом случае такую же линейную форму  $\tau = (\gamma/g) T_e \equiv \alpha T_e$ , как это было предсказано в теории Аллена, где

$$\tau = \frac{\pi}{3} \frac{k_B}{\lambda' \langle \omega^2 \rangle} T_e.$$

Используя экспериментальное значение  $\lambda' \langle \omega^2 \rangle = 475 \pm 30$  меВ<sup>2</sup>, можно определить параметр  $\alpha$ :

$$\alpha = (1,28 \pm 0,06) \cdot 10^{-16} \text{ с/К}.$$

Таким образом, неизвестную постоянную электрон–атомного взаимодействия  $g$  в уравнении (14) можно выразить через параметры  $\alpha$  и  $\gamma$ :

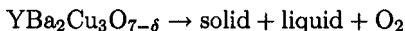
$$g = \gamma/\alpha.$$

С вычислительной точки зрения наиболее удобным оказалось представление уравнения (14) для электронной компоненты системы в виде:

$$\rho C_e(T_e) \frac{\partial T_e}{\partial t} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[ r D_e \rho C_e(T_e) \frac{\partial T_e}{\partial r} \right] - \frac{\rho C_e(T_e)}{\tau(T_e)} \cdot (T_e - T_i) + q(r, t). \quad (17)$$

В четвертом параграфе описана атомная подсистема и ее параметры. Температура плавления  $T_m$  в  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ , найденная *in situ* методами нейтронно-дифракционного анализа, приблизительно равна 1070 °С.

В представленных вычислениях принимается традиционное для МТП предложение о том, что энергия, израсходованная на формирование аморфного трека  $Q_a$ , совпадает с теплотой плавления  $Q_m$ , которая необходима для того, чтобы расплавить материал решетки в окрестности траектории иона. Теплота плавления,  $Q_m$ , была взята из работы, где исследовалась зависимость точки плавления в реакции



от давления кислорода. Обычное рассмотрение, основанное на уравнении Клапейрона-Клаузиуса, позволяет найти изменение энтальпии, отвечающее данной реакции:  $Q_m = 810 \pm 5$  кДж/мол.

Для теплоемкости решетки, согласно закону Дюлонга и Пти, было взято значение  $\rho C_i = 3,1$  Дж см<sup>-3</sup> К<sup>-1</sup>, где  $\rho = 6,39$  г см<sup>-3</sup>. Теплопроводность атомной системы  $K_i$  была выбрана в соответствии с существующими работами приведенными в диссертации,  $K_i = 5,6 \cdot 10^{-2}$  Дж(с см К)<sup>-1</sup>. Поскольку величина  $K_i$  считается не зависящей от температуры, можно ввести коэффициент теплопроводности  $D_i = K_i/\rho C_i$  и уравнение (15) записать в виде:

$$\frac{\partial T_i}{\partial t} = D_i^{eff}(T_i) \Delta T_i + \frac{1}{\tau(T_e)} \frac{C_e(T_e)}{C_i^{eff}(T_i)} (T_e - T_i), \quad (18)$$

где

$$C_i^{eff} = C_i + Q_m \delta(T_m - T_i) \quad (19)$$

— эффективная теплоемкость, которая включает теплоту плавления  $Q_m = 1,216$  кДж/г. Формально в (18) можно положить (с учетом того, что  $\delta$ -функция находится в знаменателе выражения для  $D_i$ )

$$D_i^{eff}(T_i \neq T_m) = D_i, \quad D_i^{eff}(T_i = T_m) = 0$$

и, таким образом, представить (18) в виде "прямой суммы" двух простых уравнений теплопроводности с регулярными коэффициентами.

Для численного решения системы (17) – (18) было проведено сглаживание коэффициентов  $C_i^{eff}$  и  $D_i^{eff} = K_i/\rho C_i^{eff}$  в некоторой окрестности температуры плавления (в интервале  $T_m - \Delta \leq T_i \leq T_m + \Delta$ ) следующим образом:

$$C_i^{eff}(T_i) = C_i + \frac{Q_f - 2C_i\Delta}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{(T_i - T_m)^2}{2\sigma^2}\right) \quad (20)$$

с параметрами  $\sigma = 5$  К,  $\Delta = 4,5 \sigma$ .

В пятом и шестом параграфах приведен метод численного решения и проверки точности разностных схем. Система (17) – (18) решалась на неравномерной прямоугольной сетке с постоянными шагами  $h_1, h_2$  по радиусу  $r \in [r_{min}, r_{max}]$  и постоянным шагом  $h_t$  по времени  $t \in [0, t_{max}]$ :

$$\tilde{\omega}_h = \{r_i = r_{min} + i \cdot h_1, i = 0, \dots, N_1; r_i = r_{mid} + i \cdot h_2, i = N_1 + 1, \dots, N_2\}$$

$$\tilde{\omega}_{h_t} = \{t_i = i \cdot h_t, i = 0, \dots, N\}$$

$$h_1 = (r_{mid} - r_{min})/N_1, h_2 = (r_{max} - r_{mid})/N_2, h_t = t_{max}/N$$

По нескольким причинам мы поставим  $r_{mid} = 10,1$  нм и возьмем  $h_1 < h_2$ . Это, во-первых связано с тем, что большая часть энергии источника выделяется в области  $r < 10$  нм. Во-вторых, граница фазового перехода, которую мы рассматриваем находится также в этом диапазоне. Таким образом удается более точно и экономно решать систему (14) – (15).

Введем обозначение:

$$\tilde{C}_e = \rho C_e(T_e), \quad \tilde{K}_e = D_e \rho C_e(T_e), \quad \tilde{C}_i = \rho C_i^{eff}, \quad \tilde{D}_i = D_i^{eff}.$$

Для аппроксимации системы уравнений использовалась конечно-разностная схема с весами  $\gamma \in [0, 1]$ :

$$\tilde{C}_{e_j}^k \frac{T_{e_j}^{k+1} - T_{e_j}^k}{h_t} = \frac{1}{r_j} \Lambda \left[ \gamma r_j \tilde{K}_{e_j}^k T_{e_j}^{k+1} + (1 - \gamma) r_j \tilde{K}_{e_j}^k T_{e_j}^k \right] - \frac{\tilde{C}_{e_j}^k}{\tau_j^k} (T_{e_j}^k - T_{i_j}^k) + q_j^{k+1/2}, \quad (21)$$

$$\frac{T_{i_j}^{k+1} - T_{i_j}^k}{h_t} = \frac{\tilde{D}_i}{r_j} \Lambda \left[ \gamma r_j T_{i_j}^{k+1} + (1 - \gamma) r_j T_{i_j}^k \right] + \frac{\tilde{C}_{e_j}^k}{\tau_j^k \tilde{C}_{i_j}^k} (T_{e_j}^k - T_{i_j}^k), \quad (22)$$

где

$$\Lambda(r_j \tilde{K}_j T_j) = \frac{1}{\tilde{h}_j} \left[ r_{j+\frac{1}{2}} \tilde{K}_{j+\frac{1}{2}} \frac{T_{j+1} - T_j}{h_{j+1}} - r_{j-\frac{1}{2}} \tilde{K}_{j-\frac{1}{2}} \frac{T_j - T_{j-1}}{h_j} \right],$$

$$h_j = h_1, j = 0, \dots, N_1 - 1, \quad h_j = h_2, j = N_1, \dots, N_2, \quad \tilde{h}_j = (h_j + h_{j+1})/2,$$

$$T_j^k = T(r_j, t_k), \quad \tilde{C}_j^k = \tilde{C}(T_j^k), \quad \tilde{K}_j^k = \tilde{K}(T_j^k), \quad \tau_j^k = \tau(T_j^k), \quad q_j^{k+1/2} = q(r_j, t_k + h_t/2),$$

$$r_{j+\frac{1}{2}} = \frac{r_j + r_{j+1}}{2}, \quad \tilde{K}_{j+\frac{1}{2}}^k = \frac{\tilde{K}(T_j^k) + \tilde{K}(T_{j+1}^k)}{2}.$$



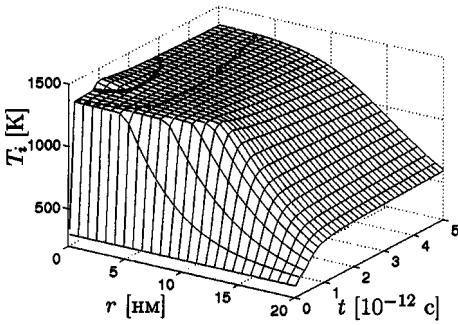


Рис. 6:  $T_i(r, t)$  для иона  $^{129}\text{Xe}$  (2,6 МэВ/нуклон) в  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$ . Разрывная линия отвечает  $T_i = T_m$ , непрерывная линия соответствует  $T_i = T_m + \Delta$ , т.е. полному окончанию процесса плавления.

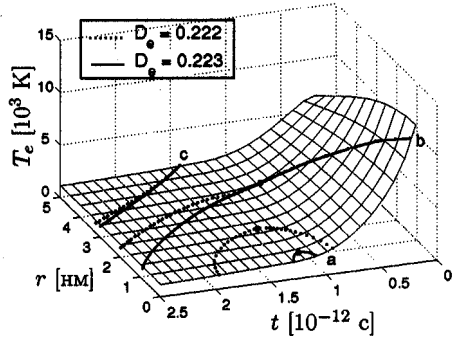


Рис. 7: Бифуркация траекторий описывающих электронную температуру в точках, где  $T_i = T_m + \Delta$ ,  $T_i = T_m$  и  $T_i = T_m - \Delta$  (кривые *a*, *b* и *c* соответственно) в  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$  для  $^{129}\text{Xe}$  (41 МэВ/нуклон).

В седьмом параграфе описаны особенности найденного решения. Численное исследование системы (17) – (18) с физическими параметрами, соответствующими  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$ , выявило ряд новых, достаточно неожиданных эффектов. Один из них, о котором уже шла речь в предыдущей главе диссертации, обусловлен присутствием источника мощности  $q(x, t)$  в исходных уравнениях. На рис. 6 показано распределение температуры  $T_i(r, t)$  для иона  $^{129}\text{Xe}$  с энергией 2,6 МэВ/нуклон. Вместо отчетливой границы двух фаз, видно пространственный слой ненулевой толщины, который нагрет до температуры плавления, и два скачка градиента температуры на внутренних и внешних границах слоя.

Численные эксперименты также выявили пороговое явление, имеющее место, когда значения  $D_e$  и  $Q_f$  являются достаточно большими (при фиксированной величине параметра  $D_i$ ). Этот случай показан на рис. 7, где приведены температуры электронов в точках  $r(t)$ , отвечающих следующим фиксированным температурам атомов:  $T_i(r, t) = T_m + \Delta$ ,  $T_i(r, t) = T_m$  и  $T_i(r, t) = T_m - \Delta$  (кривые *a*, *b* и *c*, соответственно). Точка на кривой *a* отвечает теоретическому радиусу трека. Видно, что при небольших изменениях  $D_e$  электронные температуры вдоль траекторий *c* и *b* испытывают бифуркацию. В результате, это малое изменение параметра  $D_e$  приводит к резкому изменению траектории *a*, описывающей формирование трека.

Причины такого нерегулярного поведения разъясняют рис. 8 и 9, где показана

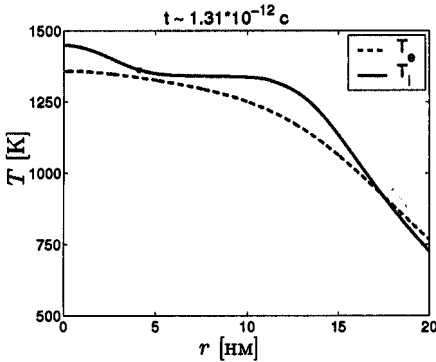


Рис. 8:  $T_e(r)$ ,  $T_i(r)$  для иона  $^{208}\text{Pb}$  с энергией 3,7 МэВ/нуклон в  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$ .

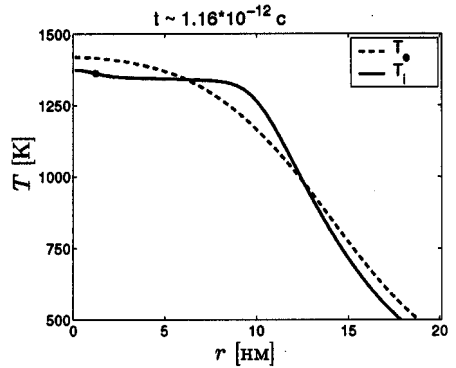


Рис. 9:  $T_e(r)$ ,  $T_i(r)$  для иона  $^{129}\text{Xe}$  с энергией 10 МэВ/нуклон в  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$ .

но распределение электронной температуры и температуры решетки в момент времени  $t_a$ , когда радиус расплавленной области достигает своего максимального значения  $r = a$  (обозначается граница трека). Радиус трека обозначен точкой на непрерывной кривой. "Плато" при  $T_i = T_m$  свидетельствует о существовании в этот момент жидкой фазы вещества, возникшей в результате электронного нагрева. Однако, к моменту времени  $t_a$  электронная температура в центре трека уже стала ниже чем  $T_m$ , и, таким образом, начался процесс "электронной закалки" материала (см. рис. 8). В некотором смысле противоположный процесс, тогда атомы в момент времени  $t_a$  все еще нагреваются электронами, который возможен при других экспериментальных условиях, показан на рис. 9. Численные эксперименты показали, что переход от электронного нагревания к электронному охлаждению, вызванному малыми изменениями  $D_e$ , и является причиной неустойчивости, показанной на рис. 7.

В восьмом параграфе проведено сравнение расчетов с экспериментом. Экспериментально полученные радиусы треков  $r_{exp}$ , в  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$  с ориентацией оси [001] параллельно траектории иона приведены в таблице 1 вместе с результатами наших расчетов. Температуропроводность электронов  $D_e \equiv K_e/\rho C_e$  выбрана таким образом, чтобы теоретические значения радиусов треков совпадали с экспериментальными  $r_{exp}$ . Неточность расчетов для  $^{129}\text{Xe}$  (41 МэВ/нуклон) обусловлена его попаданием в область бифуркации (см. рис 7).

Расчетные зависимости температуры решетки в области трека показаны в виде двух нижних кривых на рис. 10, где пунктирная и непрерывная линии относятся к границе ( $r =$  радиусу трека) и центру трека ( $r = 0$ ) соответственно.

Таблица 1: Экспериментально найденные радиусы треков  $r_{exp}$  в монокристалле  $YBa_2Cu_3O_{7-x}$  и результаты теоретического описания. Выделившаяся энергия  $dE/dx$  найдена с помощью программы SRIM 3003.

Ион	Энергия, МэВ/нуклон	$dE/dx$ , кэВ/нм	$r_{exp}$ , нм	$a$ , нм	$D_e$ , $см^2/с$
$^{129}Xe$	1,3	26,2	2-3	2,71	0,730
$^{129}Xe$	2,6	30	2,5	2,49	0,768
$^{129}Xe$	10	27,9	1,3	1,35	0,605
$^{129}Xe$	27	18,7	1,3	1,6	0,326
$^{129}Xe$	41	14,8	0,56	0,44-1,55	0,223-0,222
$^{208}Pb$	3,7	43,7	4	4,1	1,130
$^{208}Pb$	10	42,5	3	3,02	1,015
$^{208}Pb$	20	37	3,5	3,52	0,805
$^{208}Pb$	25	34,5	3	3,06	0,732

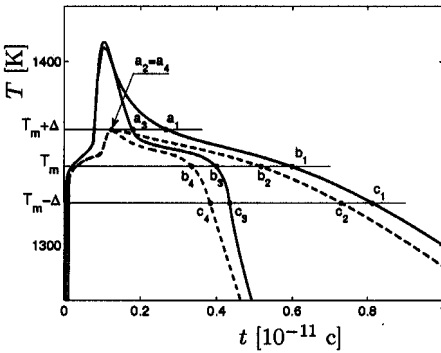


Рис. 10: Эволюция температуры решетки на границе и в центре трека (пунктирная и непрерывная линии соответственно) для иона  $^{129}Xe$  (2,6 МэВ/нуклон).

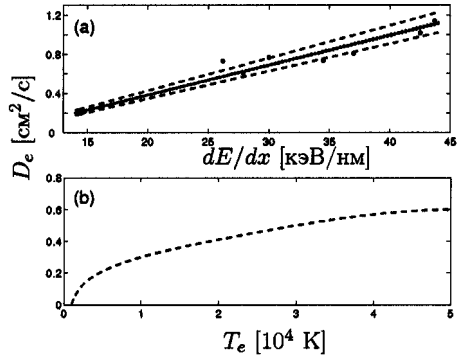


Рис. 11: (а) Зависимость электронной теплопроводности  $D_e$  от  $dE/dx$  в  $YBa_2Cu_3O_{7-x}$ , найденная с помощью МТП (точки). (б) Теоретическая зависимость  $D_e(T_e)$  для аморфного углерода.

Влияние электронной закалки на скорость охлаждения очевидно из сравнения этих кривых с двумя верхними, полученными для случая, когда обратная передача тепла от атомов решетки к электронам, имеющая место при  $T_e < T_i$ , была искусственно "выключена".

Рис. 10 позволяет проверить гипотезу "эпитаксиального восстановления", согласно которой внешняя часть трека не переходит в аморфное состояние из-за краткости времени  $\tau_m$  ее пребывания в жидком состоянии. Значения для времен пребывания при температуре выше  $T_m + \Delta$  действительно сильно различаются (точки  $a_i$  на рис. 10). Однако, соответствующие значения  $\tau_m$  для точек, в которых  $T_m$  и  $T_i = T_m - \Delta$  очень близки (точки  $b_i$  и  $c_i$ , соответственно). Из выражения (20) видно, что теплота плавления поглощается главным образом в узком температурном интервале  $T_m - \sigma \leq T_i \leq T_m + \sigma$  в окрестности температуры плавления  $T_i = T_m$ , поэтому разумно считать, что в рассматриваемой модели для всех точек трека  $\tau_m \simeq 0,4 \cdot 10^{-11}$  с (см. продолжительность времени пребывания в расплавленном состоянии для точки  $b_3$ , отвечающей  $T_i = T_m$ ). Таким образом вычисления показали, что очень существенное "эпитаксиальное восстановление", обусловленное малым временем  $\tau_m$  пребывания внешних областей трека в расплавленном состоянии, в рамках традиционной модели термопика представляется маловероятной.

Зависимость полученной электронной температуропроводности  $D_e$  от потерь энергии  $dE/dx$  налетающего иона показана на рис. 11 (а). Непрерывная линия представляет соответствующие усредненные значения. Разрывная линия демонстрирует неточность, обусловленную экспериментальными ошибками параметра  $\alpha = (1,3 \pm 0,1) \cdot 10^{-16}$  с/К. Экспериментальная ошибка теплоты плавления незначительна (представлена маленькими "волнами" вдоль непрерывной линии). Основными источниками ошибок, наблюдаемых в виде точек, рассеянных вокруг сплошной линии, являются флуктуации экспериментально измеренных радиусов треков, а также ошибки расчета величины  $dE/dx$ .

Рис. 11 (а) свидетельствует о том, что параметр  $D_e$  для  $YBa_2Cu_3O_{7-x}$  нельзя считать независимым от электронной температуры, как это предполагается в каэнской версии МТП. В поддержку этого вывода на рис. 11 (b) приведена зависимость  $D_e$  от  $T_e$  для аморфного углерода, полученная на основе теоретических результатов работы [G. Sciwietz et al., Nucl. Instr. and Meth. B164-165, 354 (2000)]. Видно, что в этом случае температуропроводность также увеличивается с ростом температуры электронов в области  $T_e \sim 10^3$  К. Именно такие температуры являются типичными при трекообразовании в  $YBa_2Cu_3O_{7-x}$ .

Наиболее важно, однако, то, что найденные значения  $D_e$  оказались действительно близкими к величине  $D_e \simeq 1 \text{ см}^2/\text{с}$ , которая обычно считается вполне обоснованной теоретически в казнской и некоторых других моделях формирования треков. Таким образом, результаты расчетов, полученные в рамках разработанной в диссертации модели температурного пика, выглядят с этой точки зрения достаточно реалистичными.

В третьей главе проведена проверка гипотезы перегрева, а также связанное с этим развитие модели в направлении явного учета процессов охлаждения ядер электронами в сверхплотной сильно неравновесной плазме, образующейся при схлопывании кавитационного пузырька в D-ацетоне. Актуальность этих исследований обусловлена появившимися в последнее время сообщениями о регистрации продуктов термоядерных реакций при акустической кавитации в  $\text{C}_3\text{D}_6\text{O}$  [Taleyarkhan R.P. et al., Phys. Rev. E. 2004. V.69. P. 036109]. Поскольку в рассматриваемой модели предполагается, что электроны характеризуются определенной температурой  $T_e$ , расчеты энергии электронов  $E_e$ , фактически сводятся к расчетам их теплоемкости  $C_e(T_e)$ . Информация о параметре электрон-ионной связи  $g$ , как и в процессе трекообразования, эквивалента знаению времени  $\tau$  электрон-ионной релаксации. Основные проблемы, связанные с предлагаемым в диссертации обобщением модели [Nigmatulin R.I. et al., J. Acoust. Soc. Am. 2003. V.113. P. 2205] связаны именно с необходимостью расчета параметров  $g$  и  $e(T_e)$ , так как информация об остальных параметрах уже содержится в той или иной форме в работах других авторов.

Первый параграф посвящен оценке времени охлаждения ядер электронами в сверхплотной сильно неравновесной плазме.

В первом и втором пунктах приведена оценка начальной температуры и дано краткое описание общей теории процессов электрон-ионной релаксации в высокотемпературной плазме.

В третьем и четвертом пунктах дана конечно-разностная аппроксимация, традиционно используемая при расчетах электрон-ионной релаксации, с учетом зависимости  $\tau_{Ne}$  от  $T_e$ . Для простой оценки времени релаксации может быть использовано уравнение Ландау:

$$\frac{dT_e}{dt} = \frac{T_{eq} - T_e}{\tau_{Ne}}. \quad (23)$$

Предполагая, что температура ядерной подсистемы в начале процесса релаксации равна  $2 \cdot 10^8 \text{ К}$ , получим для плазмы, образовавшейся в результате ионизации молекул  $\text{C}_3\text{D}_6\text{O}$ , отношение между температурами электронной и ядерной

компонент:

$$T_N = 2 \cdot 10^8 - 3, 2T_e.$$

Условие равновесия  $T_N = T_e = T_{eq}$  дает  $T_{eq} = 10^8/2, 1$  К. Учитывая тот факт, что время релаксации внутри ядерной подсистемы существенно меньше времени ядерно-электронной диссипации, получаем для характерного времени  $\tau_{Ne}$  охлаждения ядер электронами соотношение

$$\frac{1}{\tau_{Ne}} = \frac{1}{\tau_D} + \frac{1}{\tau_C} + \frac{1}{\tau_O}.$$

Оценка величины  $\tau$  получена в [Спитцер Л., Физика полностью ионизированного газа. М.: ИЛ, 1957.]:

$$\tau = \frac{250 A_i T_e^{3/2}}{n_i Z_i^2 \ln \Lambda_i}. \quad (24)$$

Здесь  $A_i$  – атомный вес ядра,  $Z_i$  – его атомный номер,  $\ln \Lambda_i$  – кулоновский логарифм, который может быть вычислен лишь приближенно (разные авторы приводят разные значения). Если в качестве радиуса экранирования электрического поля в плазме взять радиус Дебая, то придем к следующей часто используемой оценке (в СГСЭ):

$$\Lambda_i = \frac{3}{2} \frac{(kT_e)^{3/2}}{e^3 (4\pi n_i)^{1/2} Z_i^2}. \quad (25)$$

Для решения уравнения Ландау применялись схемы Рунге-Кутты, четвертого порядка точности. На рис. 12 показаны зависимости  $T_N(t)$  и  $T_e(t)$  К, отвечающие уравнению (23) при начальной температуре электронов  $T_e(0) = 4 \cdot 10^6$  К. На оси  $t$  отмечен момент времени, когда начальная температура ядер уменьшается приблизительно в  $e \simeq 2, 72$  раз. Видно, что неопределенность в начальной температуре электронов  $T_e = 4 \cdot 10^6 \div 10^7$  К почти не сказывается на оценке длительности ядерно-электронной релаксации, которая оказывается приблизительно равной  $8 \cdot 10^{-13}$  с.

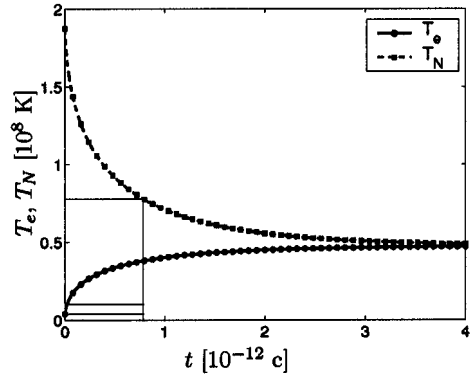


Рис. 12: Временная эволюция температуры ядер  $T_N(t)$  и электронов  $T_e(t)$  с учетом зависимости времени релаксации  $\tau_{Ne}$  от  $T_e(t)$

В пятом пункте сформулированы основные выводы. Оценки с использованием аналитической формулы (24), полученной Спитцером, показывают, что

электронная компонента плазмы действительно может оставаться относительно холодной на протяжении заметной части времени существования сверхплотного состояния вещества в схлопывающемся кавитационном пузырьке в  $C_3D_6O$ . Расчеты, выполненные на основе такого модельного допущения, предсказывают в этом случае возможность осуществления термоядерных реакций D-D слияния со скоростью порядка одного события на одно схлопывание пузырька при температуре D-ацетона около 273 К. Оптимизма относительного этого новой возможности реализации термоядерного синтеза прибавляют также два дополнительных обстоятельства. Во-первых, более тщательное численное моделирование показывает, что оценки, выполненные с помощью аналитических формул типа (24), использовавшихся в данной работе, дают некоторое занижение величины времени релаксации. Во-вторых, расчеты в рамках гидродинамической модели, говорят о том, что дальнейшее понижение температуры D-ацетона приводит к уменьшению времени существования термоядерной плазмы почти до значения  $10^{-13}$  с, в то время как выход нейтронов при этом увеличивается.

Во втором параграфе выполнены расчеты теплоемкости электронов в неравновесной плазме, которые использовались при оценке температуры электронов в момент начала электрон-ионной релаксации.

В первом пункте приведена формулировка модели для вычисления теплоемкости электронов в плазме, образующейся при схлопывании кавитационного пузырька в D-ацетоне и приведены результаты расчета.

Среднее число электронов с энергией  $E$  будем описывать распределением Ферми для невзаимодействующих частиц:

$$\langle N \rangle = \frac{1}{e^{(E-\mu(T))/K_B T} + 1}, \quad (26)$$

где  $T$  – температура электронов,  $K_B$  – постоянная Больцмана,  $\mu(T)$  – химический потенциал электронов, находящихся в электрическом поле ионов.

Из того, что при  $T = 0$  все электроны находятся в связанном состоянии следует, что значение химического потенциала  $\mu$  при нулевой температуре равно наибольшей энергии связи электрона в атомах C, D и O, т.е. 871,1 эВ. Выделяя в выражении для химического потенциала эту величину отдельным слагаемым,

$$\mu(T) = \mu(0) + \Delta\mu(T),$$

выражению (1) нетрудно придать вид

$$\langle N_{i,b} \rangle = \frac{1}{e^{-(\epsilon_i + \Delta\mu)/K_B T} + 1}, \quad \langle N_{k,f} \rangle = \frac{1}{e^{(\epsilon_k - \Delta\mu)/K_B T} + 1},$$

соответственно для связанных и свободных состояний. Здесь  $\epsilon_i = \mu(0) - E_i$  — энергия связи, отвечающая  $i$ -му электронному уровню,  $\epsilon_k = p_k^2/2m$  — энергия свободного электрона.

Зависящая от температуры поправка к постоянной части химического потенциала  $\Delta\mu(T)$  находится из условия сохранения полного числа электронов

$$\sum_i (1 - \langle N_{i,b} \rangle) = \sum_k \langle N_{k,f} \rangle, \quad (27)$$

где суммирование выполняется с учетом кратности вхождения атома данного сорта в молекулу  $C_3D_6O$ . Заменяя обычным образом сумму по состояниям свободных электронов интегралом (здесь  $v$  — объем, приходящийся на одну молекулу вещества)

$$\frac{\sqrt{2}vm^{3/2}}{\pi^2\hbar^3} \int_0^\infty \frac{\sqrt{\epsilon}d\epsilon}{e^{(\epsilon-\Delta\mu)/K_B T} + 1} = \frac{\sqrt{2}v(mK_B T)^{3/2}}{\pi^2\hbar^3} \int_0^\infty \frac{\sqrt{z}dz}{e^{z-\Delta\mu/K_B T} + 1},$$

получим уравнение для определения величины поправки  $\Delta\mu(T)$

$$\sum_i n_i \left( 1 - \frac{1}{e^{-(\epsilon_i + \Delta\mu)/K_B T} + 1} \right) = \text{const } T^{3/2} \int_0^\infty \frac{\sqrt{z}dz}{e^{z-\Delta\mu/K_B T} + 1}, \quad (28)$$

где  $n_i$  — кратность вхождения атомов в формулу вещества.

Теплоемкость электронов, отнесенная к одной молекуле вещества, может быть найдена прямым дифференцированием полной энергии свободных электронов:

$$C_V = \left( \frac{\partial U}{\partial T} \right)_V = \frac{3}{2} K_B \sum_i n_i \langle N_{i,f} \rangle + \sum_i n_i \epsilon_i \frac{d\langle N_{i,f} \rangle}{dT},$$

где суммирование выполняется по всем связанным состояниям электронов.

На рис. 13 представлена рассчитанная таким образом теплоемкость электронов в области сильной ионизации при сжатиях  $\rho/\rho_0 = 1, 10$  и  $100$ , переведенная в более удобные для практического использования единицы. Видно, что она не описывается линейной зависимостью  $C = \gamma T$ , справедливой для вырожденного электронного газа в широкой потенциальной яме с плоским дном при температурах меньше или порядка температуры Ферми, когда постоянная (Зоммерфельда)  $\gamma$  может быть рассчитана по формуле

$$\gamma = K_B^2 \left( \frac{\pi}{3} \right)^{2/3} \frac{m}{\hbar^2} N \left( \frac{v}{N} \right)^{2/3},$$

где  $N$  — полное число электронов в молекуле.

Для моделирования процессов схлопывания кавитационного пузырька важно иметь простые, но в тоже время, достаточно точные интерполяционные формулы расчета зависимости  $C_V(T_e, \rho/\rho_0)$ .



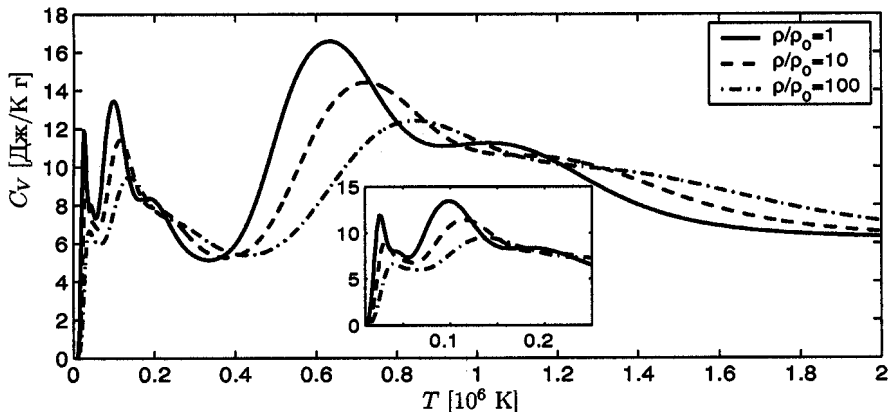


Рис. 13: Теплоемкость электронов для молекулы D-ацетона при разных сжатиях  $\rho/\rho_0$ , рассчитанная в соответствии с рассматриваемой моделью.

Во втором пункте решена задача интерполяции с точностью, достаточной для математического моделирования процесса. Найлены интерполяционные формулы, которые позволяют с помощью нескольких вычисленных значений теплоемкостей при сжатиях  $\rho/\rho_0 = 1, 10$  и  $100$  находить значения во всем интервале температур и плотностей образующейся плазмы, с относительной точностью меньше 4%.

В заключении сформулированы основные результаты диссертации.

В приложении к диссертации находятся следующие материалы:

- Таблица значений химических потенциалов для некоторых характерных температур электронов при разных степенях сжатия, которые позволяют рассчитать, используя распределение Ферми, средние числа заполнения электронных уровней в D-ацетоне.
- Программа 1, которая вычисляет значения теплоемкостей электронов в  $C_3D_6O$  решая уравнение (28). Она легко может быть адаптирована для проведения аналогичных расчетов и для других веществ.
- Программа 2, которая вычисляет значения теплоемкостей электронов в  $C_3D_6O$  с помощью интерполяционных формул.

Программы написаны в среде SCILAB 3.0-RC1 (May 17, 2004), которая является бесплатно распространяем аналогом MATLAB (<http://scilabsoft.inria.fr>).

## *На защиту выдвигаются следующие результаты*

1. Разработаны, протестированы и применены новые эффективные алгоритмы расчета, использующие разностные схемы второго порядка точности для решения уравнений теплопроводности с учетом фазовых переходов и источников энерговыделения.
2. Разработан комплекс математических моделей и программ для расчета процессов тепловой релаксации в образцах, подвергаемых облучению ускоренными ионами. С его помощью были выполнены исследования взаимодействий ионов с веществом и получены следующие результаты:
  - а) Изучен процесс формирования и релаксации термоупругих напряжений в материалах, испытывающих интенсивную ионную бомбардировку. Сформулирована модель пространственно-временной динамики энерговыделения в тонких пленках, отвечающая имеющимся источникам со взрывной ионной эмиссией. Установлено, что максимальные механические напряжения, возникающие вследствие теплового расширения вещества, не превышают ни предел текучести железа, ни его временное сопротивление разрыву и таким образом не являются ответственными за модификацию образца.
  - б) В результате численных экспериментов и аналитических оценок получен вывод о невозможности постановки традиционной задачи Стефана для описания движения границы раздела твердой и жидкой фаз в том случае, когда в уравнении модели присутствует источник энерговыделения.
  - в) В рамках концепции температурного пика рассмотрены процессы трекообразования в высокотемпературных сверхпроводниках. С учетом имеющихся теоретических и экспериментальных данных разработана модель процесса энерговыделения, описывающая его пространственно-временную динамику. Уточнена модель электронной подсистемы с использованием теории Аллена и результатов фемтосекундных лазерных экспериментов.
  - г) Продемонстрирована применимость концепции температурного пика для описания процессов трекообразования в иттриевых сверхпроводниках. Установлена бифуркационная зависимость решений от параметра температуропроводности электронов, связанная с процессом электронной закалки.

3. Разработана математическая модель электрон-ионной релаксации в плазме, образующейся при схлопывании кавитационного пузырька в D-ацетоне и создан комплекс программ для расчета неизвестных параметров модели. Вычислено время охлаждения ядер электронами, а также теплоемкость электронов во всем интервале температур и плотностей образующейся плазмы. Решена задача интерполяции теплоемкости электронов с точностью, достаточной для математического моделирования процесса релаксации.

*По теме диссертации опубликованы следующие работы:*

1. Ayrjan E.A., Fedorov A.V., Kostenko B.F., Pribiš J. *Calculations of temperature fields in the vicinity of ion track within a thermal-spike model*. Journal of Computational Methods in Sciences and Engineering (JCMSE), 2, 1-2, 2002, pp. 163–168
2. Kostenko B.F., Pribiš J., Puzynin I.V. *Stefan Problem and Beyond*. e-print: math-ph/0302044, 2003, to be published in Journal of Computational Methods in Sciences and Engineering (JCMSE).
3. Костенко Б.Ф., Прибиш Я. *Математическое моделирование трекообразования в высокотемпературных сверхпроводниках*. Вестник РУДН, сер. Прикладная математика, 2005, т. 4, № 1, с.75–87.
4. Kostenko B.F., Pribiš J., Goncharov I.N. *Thermal spike model of track formation in  $YBa_2Cu_3O_{7-x}$* . Preprint JINR E17-2005-61, Particle and Nuclei Letters, 1(130), Vol. 3, 2006, pp. 31–44.
5. Амирханов И.В., Айрян Э.А., Федоров А.В., Костенко Б.Ф., Прибиш Я., Сархадов И. *Численное моделирование термоакустических процессов, генерируемых интенсивными ионными пучками в тонких образцах*. Сообщение ОИЯИ, P11-2000-271, 2000.
6. Костенко Б.Ф., Прибиш Я. *Оценка времени охлаждения ядер электронами в сверхплотной сильно неравновесной плазме*. Сообщение ОИЯИ, P4-2004-42, 2004.
7. Костенко Б.Ф., Прибиш Я. *Теплоемкость электронов в плазме, образующейся при схлопывании кавитационного пузырька в D-ацетоне*. Сообщение ОИЯИ, P11-2004-193, 2004.

8. Pribiš, J. *Numerical solution of system of partial differential equations which describes thermoelastic effects during irradiate*. Proceedings of International Scientific Conference on Mathematics, 2000, Herl'any, Slovakia, pp.156–158, (Univ. Technol. Košice, 2000).
9. B.F. Kostenko, J. Pribis, I.V. Puzynin, V.A. Skuratov, S. Zinkle, *Numerical Solution of Heat Relaxation Processes within the Thermal Spike Model*. Proceeding of Workshop "European Network on Ion Track Technology", CIRIL - GANIL, Caen, France, 24-26 February, 2002, p. 39.
10. Ayrjan E. A., Kostenko B.F., Pribiš J. *Numerical simulation of heat relaxation processes within thermal spike model*. Proceedings of the 7th International Scientific Conference, Section Applied Mathematics, 2002, Košice, Slovakia, pp.16–20.
11. И.Н.Гончаров, Б.Ф. Костенко, Я.Прибиш., *Расчет поперечных размеров треков в монокристалле  $YBa_2Cu_3O_{7-x}$  с учетом зависимости скорости передачи энергии решетке от температуры возбужденных электронов*. V Международный уральский семинара по радиационной физике металлов и сплавов, Снежинск, 2003, Аннотации докладов, с. 19.
12. Kostenko B.F., Pribiš J., *Математическое моделирование трекообразования в высокотемпературных сверхпроводниках*. XLI Всероссийская конференция по проблемам математики, информатики, физики и химии, 18-22 апреля 2005, Тезис докладов - Физические секции, Москва, РУДН, 2005, с.36.

Получено 22 сентября 2005 г.

Отпечатано методом прямого репродуцирования  
с оригинала, предоставленного автором.

Макет *Н. А. Киселевой*

Подписано в печать 22.09.2005.

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

Усл. печ. л. 1,62. Уч.-изд. л. 1,75. Тираж 100 экз. Заказ № 55020.

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

E-mail: [publish@pds.jinr.ru](mailto:publish@pds.jinr.ru)

[www.jinr.ru/publish/](http://www.jinr.ru/publish/)