

ТАДЖИКСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
НАУЧНО-ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ИНСТИТУТ

На правах рукописи

УДК 534.8, 621.3.082.4

Исмаев Толиб Набиджонович

ТЕРМОУПРУГАЯ ГЕНЕРАЦИЯ АКУСТИЧЕСКИХ ВОЛН В
МЕТАЛЛАХ ПОД ДЕЙСТВИЕМ БЫСТРЫХ ТЯЖЁЛЫХ ИОНОВ
В РАМКАХ МОДЕЛИ ТЕРМИЧЕСКОГО ПИКА

Специальность: 1.3.8. – физика конденсированного состояния

ДИССЕРТАЦИЯ
на соискание ученой степени кандидата
физико-математических наук

Научный руководитель:

Член-корреспондент НАНТ,
доктор физико-математических наук,
профессор Салихов Т.Х.

Душанбе – 2026

ОГЛАВЛЕНИЕ	стр.
СПИСОК СОКРАЩЕНИЙ.....	4
ВВЕДЕНИЕ	5
ГЛАВА I. ЛИТЕРАТУРНЫЙ ОБЗОР. ФИЗИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ БЫСТРЫХ ТЯЖЕЛЫХ ИОНОВ С МЕТАЛЛАМИ И МЕХАНИЗМЫ РАДИАЦИОННОГО НАГРЕВА	11
1.1. Особенности взаимодействия быстрых тяжелых ионов с конденсированными средами и механизмы потерь энергии	11
1.2. Теоретические модели тепловой релаксации в металлах: модель термического пика и двухтемпературное приближение	22
1.3. Термоупругий механизм генерации акустических волн в металлах при радиационном воздействии	36
ГЛАВА II. ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИЕ АСПЕКТЫ ВОЗДЕЙСТВИЯ ИМПУЛЬСНЫХ ПУЧКОВ ИОНОВ С МЕТАЛЛАМИ	45
2.1. Формирование нестационарного радиального распределения температурного поля металлов при воздействии импульсного ионного пучка со ступенчатым временным профилем	46
2.2. Формирование температурного поля в металлических пластинах под действием пучка ионов с экспоненциальным временным и гауссовым радиальным затуханием	54
2.3. Формирование температурных полей в металлических пластинах под действием ионного пучка с гауссовым временным и экспоненциальным радиальным распределением	63
2.4. Формирование температурных полей в металлических мишенях под действием быстрых тяжелых ионов с учетом затухания электронных потерь энергии по глубине (аппроксимация Лямшева)	69
2.5. Формирование температурных полей в полубесконечных образцах при воздействии ионного пучка, представленного в виде эквивалентного поверхностного источника тепла	81

ГЛАВА III. ОСОБЕННОСТИ ГЕНЕРАЦИИ АКУСТИЧЕСКИХ ВОЛН В МЕТАЛЛАХ ПОД ДЕЙСТВИЕМ ПУЧКА ИОНОВ	89
3.1. Генерация акустических волн в полубесконечных металлических образцах при воздействии ионного пучка с экспоненциальным времен- ным и гауссовым радиальным затуханием	89
3.2. Генерация акустических волн в металлических пластинах при воз- действии ионного пучка с экспоненциальным временным и гауссовым радиальным затуханием	96
3.3. Генерация акустических волн в полубесконечных металлических образцах с учетом затухания электронных потерь по глубине (аппрок- симация Лямшева)	103
3.4. Генерация акустических волн в полубесконечных образцах при воздействии ионного пучка, представленного в виде эквивалентного поверхностного источника тепла	111
ВЫВОДЫ	116
ЛИТЕРАТУРА	118
ПРИЛОЖЕНИЯ	133

СПИСОК СОКРАЩЕНИЙ

АВ	–	Акустическая волна
АИ	–	Акустический импульс
БТИ	–	Быстрые тяжёлые ионы
МН	–	Механическое напряжение
МТП	–	Модель термического пика
ТП	–	Температурное поле
ТУН	–	Термоупругое напряжение

ВВЕДЕНИЕ

Актуальность темы исследования. Стремительное развитие ускорительной техники и технологий, связанных с использованием пучков быстрых тяжелых ионов (БТИ) открывает широкие перспективы для модификации материалов, создания новых функциональных структур и устройств, а также для фундаментальных исследований в физике твердого тела. Взаимодействие тяжелых ионов с металлами сопровождается разнообразными физическими процессами, среди которых особое место занимают термоупругие эффекты, обусловленные локальным и интенсивным выделением энергии в зоне проникновения ионов [1-49].

Исследование термоупругих эффектов при взаимодействии тяжелых ионов с металлами имеет важное значение для понимания механизмов радиационного повреждения, формирования дефектов и треков, а также для прогнозирования поведения материалов в условиях интенсивного облучения. Эти знания необходимы для разработки радиационно-стойких материалов для ядерной энергетики и космической техники, а также для создания новых методов ионной имплантации и модификации поверхности [50-74].

Процессы теплопереноса играют ключевую роль в формировании термоупругого отклика металлов на импульсное воздействие БТИ. Быстрый нагрев вещества в зоне трека иона приводит к возникновению высоких температурных градиентов и интенсивному теплопереносу, что существенно влияет на распределение температуры, термоупругие напряжения (ТУН) и в конечном итоге, на структурные изменения в материале. Несмотря на значительный интерес к данной проблеме и наличие достаточного количества теоретических и экспериментальных работ, комплексное исследование термоупругих эффектов при взаимодействии БТИ с металлами с учетом динамики теплопереноса остается актуальной задачей.

Степень изученности проблемы, теоретическая и методологическая основа исследования. Теоретическое описание термоупругих эффектов, возникающих при взаимодействии тяжелых ионов с металлами базиру-

ется на совместном решении уравнений теории упругости и уравнений, описывающих процессы переноса энергии и импульса в облучаемом материале. Исследования И.М. Лифшица, М.И. Каганова и Л.В. Танатарова, заложили основы для понимания радиационных изменений в металлах [1-3]. Дальнейшие исследования были посвящены моделированию теплофизических процессов при воздействии мощных импульсных пучков заряженных частиц [4-49]. Были разработаны модели, описывающие возбуждение упругих волн в твердом теле под действием ионного пучка, а также проведено численное исследование особенностей температурных полей (ТП) и ТУН, возникающих при облучении тяжелыми ионами [69-74].

В современных исследованиях обобщенная трехмерная модель термического пика адаптируется для анализа взаимодействия тяжелых ионов с тонкими мишенями и наночастицами путем усложнения теплофизического аппарата за счет учета температурной зависимости теплофизических параметров, интеграции нелинейных механизмов электрон-фононного взаимодействия, кинетики радиационных дефектов и структурно-фазовых превращений [37-40, 43, 47, 49]. Из-за высокой сложности и нелинейных эффектов эти механизмы крайне трудно описать аналитически, что привело к доминированию численных методов. В результате большинство современных работ в этой области носит вычислительный характер [71-73].

Однако, несмотря на успехи компьютерного моделирования, многие фундаментальные вопросы остаются открытыми. В частности, недостаточно изучено влияние теплопереноса на термоупругие эффекты и генерацию акустических волн (АВ) в условиях экстремальных температур [53, 57, 70]. В отличие от большинства существующих работ, ориентированных на сложные численные расчеты, в данном исследовании предлагается аналитический подход. С помощью обоснованных физических упрощений становится возможным получить четкие математические зависимости, описывающие распределение ТП и ТУН. Такой метод обеспечивает прозрач-

ность физической интерпретации процессов и позволяет глубже изучить, как микроструктура металлов влияет на их радиационную стойкость [35, 46].

Целью исследования является построение теоретической модели, адекватно описывающей термоупругие эффекты, возникающие при взаимодействии тяжелых ионов с металлами. Особое внимание уделяется роли теплопереноса в формировании термоупругого отклика материала, а также влиянию микроструктуры металла на протекание этих процессов.

Для достижения поставленной цели сформулированы следующие задачи:

- обоснование математической модели, описывающей особенности термоупругих эффектов с учётом особенностей взаимодействия тяжелых ионов с металлами;
- исследование влияния динамики теплопереноса на распределение ТП и ТУН в зоне локального нагрева с учетом ключевых механизмов релаксации энергии в рамках двухтемпературного приближения, включая электронную теплопроводность, теплопроводность кристаллической решетки и межподсистемный энергообмен;
- проведение численного расчета полученных выражений ТП и ТУН с учетом нестационарной динамики теплопереноса, геометрических параметров мишени и пространственно-временного распределения энергии пучка;
- сравнение результатов, полученных в рамках предложенной математической модели с доступными экспериментальными данными по облучению металлов.

Научная новизна работы заключается в том, что впервые:

- **проведен** аналитический анализ ТУН, возникающих при взаимодействии пучков БТИ с металлами в рамках МТП;
- **предложена** аналитическая модель, позволяющая оценить термоупругий отклик металлов на импульсное воздействие БТИ с учётом эффекта электрон-фононного взаимодействия;

- **создана** упрощенная модель формирования ТУН в металлах при воздействии БТИ с учётом динамики развития термического пика и его влияния на ТУН;
- **описаны** наблюдаемые в эксперименте параметры упругих волн, генерируемых при воздействии тяжелых ионов с металлами;
- **сформулирована** теоретическая модель термоупругого отклика на импульсное воздействие тяжелых ионов и показана возможность генерации высокочастотных упругих волн и формирования локальных зон пластической деформации в металлах.

Теоретическая и практическая значимости работы заключаются в том, что результаты позволяют оценить влияние электрон-фононного взаимодействия на формирование ТУН и генерацию упругих волн в металлах; развитая теория термоупругости для описания динамики термического пика и его влияния на ТУН в металлах при воздействии БТИ позволяет более точно предсказывать параметры упругих волн, генерируемых при ионной имплантации, прогнозировать радиационную стойкость материалов и развивать современные методы неразрушающей акустической диагностики.

Достоверность результатов обеспечиваются строгой физико-математической постановкой рассматриваемых задач, базирующейся на фундаментальных законах механики сплошных сред, термодинамики неравновесных процессов и макроскопической кинетики. Предложенные теоретические модели опираются на апробированном математическом аппарате дифференциальных уравнений в частных производных, интегральных преобразованиях, а также надежно зарекомендовавших себя физических концепциях двухтемпературного приближения и динамической теории термоупругости. Корректность полученных точных аналитических решений подтверждается их правильным асимптотическим поведением, строгими предельными переходами к известным классическим частным случаям, а также внутренним математическим контролем при проведении численных расчетов. Физическая адекватность и надежность предложенных моделей дополнительно подтвер-

ждаются удовлетворительным качественным и количественным согласием результатов теоретического моделирования профилей ТП и амплитудно-временных характеристик АВ с доступными данными экспериментальных исследований.

Выносимые на защиту положения:

- решения для пространственно-временного распределения температур электронной и ионной подсистем металла при воздействии импульсных пучков БТИ, полученные в рамках МТП с учетом реальных (гауссовых, экспоненциальных и ступенчатых) профилей пучка;
- теоретическая модель и аналитические выражения для описания динамики формирования ТУН и генерации АВ в полубесконечных металлических мишенях и пластинах с учетом эффектов пространственного затухания энергии по глубине;
- численные расчеты термоупругого отклика и закономерности, доказывающие определяющую роль кинетики электрон-фононного взаимодействия и параметров ионного импульса в формировании амплитудно-временных характеристик генерируемых высокочастотных акустических сигналов.

Соответствие диссертации паспорту научной специальности. Диссертация соответствует Паспорту номенклатуры специальностей ВАК РФ по специальности 1.3.8. – физика конденсированного состояния по следующим пунктам:

1. Теоретическое и экспериментальное исследование физических свойств неупорядоченных органических и неорганических систем, в том числе классических и квантовых жидкостей, стекол различной природы и дисперсионных систем.
2. Разработка математических моделей и прогнозирование изменения физических свойств конденсированных сред в зависимости от влияния внешних факторов.

Личный вклад соискателя состоит в анализе научной литературы по выбранной теме, обоснование математических моделей сформулированных

задач и получение решений этих уравнений, а также численных расчетов по формированию ТП и акустического сигнала в различных металлических образцах. Все результаты получены самим автором. Результаты работы были опубликованы при его непосредственном участии в виде статей и материалов конференций.

Апробация работы. Результаты работы апробированы на: VI международной конференции «Современные проблемы физики» (Душанбе, 2018); республиканской научно-теоретической конференции ППС и сотрудников ТНУ; IV международной научной конференции «Вопросы физической и координационной химий» (Душанбе, 2019); республиканской научно-практической конференции ППС и сотрудников ТНУ (Душанбе, 2020; 2022; 2025); республиканской научно-практической конференции «Современные проблемы теории дифференциальных уравнений» (Душанбе, МУТП, 2020); II научно-практической конференции «О применении дифференциальных уравнений при решении прикладных задач» (Душанбе, 2021 республиканской научно-практической конференции «Развитие и достижения физической науки в годы независимости» (Душанбе, 2023); международной научно-практической конференции «Развитие новых направлений в химии и химической технологии» (Душанбе, 2023).

Публикации по теме диссертации. Результаты опубликованы в виде 16 научных статей, 6 из которых в рецензируемых журналах из Перечня ВАК РФ.

Структура и объем диссертации. Диссертация состоит из введения, трех глав, заключения и списка цитируемой литературы. Содержание работы изложено на 139 страницах, включая 2-таблицы, 32 рисунков и списка литературы из 124 наименований.

Ключевые слова: металл, ион, импульсный пучок ионов, быстрый тяжёлый ион, температурное поле, модель термического пика, термоупругость, акустика, акустическая волна.

ГЛАВА I. ЛИТЕРАТУРНЫЙ ОБЗОР. ФИЗИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ БЫСТРЫХ ТЯЖЕЛЫХ ИОНОВ С МЕТАЛЛАМИ И МЕХАНИЗМЫ РАДИАЦИОННОГО НАГРЕВА

1.1. Особенности взаимодействия быстрых тяжелых ионов с конденсированными средами и механизмы потерь энергии

Исследование фундаментальных закономерностей взаимодействия ускоренных ионных пучков с твердым телом является базисом для построения адекватных математических моделей радиационного повреждения конструкционных материалов [1, 3-6, 30, 32, 34, 45, 46]. Характер и глубина структурно-фазовых изменений, индуцируемых в облучаемом образце, определяются сложной суперпозицией факторов, среди которых ключевую роль играют атомный номер налетающей частицы, ее масса и кинетическая энергия. В контексте задач модификации свойств материалов и исследования генерации АВ, рассматриваемых в данной работе, особый интерес представляет класс высокоэнергетических частиц, известных как БТИ [5, 13, 16, 17, 22, 23, 37-49]. Специфика их воздействия на вещество, заключающаяся в создании макроскопических треков и генерации ударных волн, требует применения теоретических подходов, отличных от классических моделей, используемых для описания нейтронного или электронного облучения.

Для систематизации физических механизмов взаимодействия заряженных частиц с веществом принята классификация, основанная на сопоставлении скорости иона v с характерной скоростью орбитального движения электронов в атомах мишени. В качестве естественного масштаба скорости в физике ионных пучков выступает скорость электрона на первой боровской орбите атома водорода v_0 , определяемая фундаментальными физическими константами [31]:

$$v_0 = \frac{e^2}{\hbar} \approx 2.19 \cdot 10^6 \text{ м/с}, \quad (1.1)$$

где e – элементарный заряд, $\hbar$ – постоянная Планка [4, 6, 75]. Отношение скорости частицы к скорости v_0 позволяет выделить три основных энергетиче-

ческих диапазона, в каждом из которых доминируют различные процессы диссипации энергии.

Первый диапазон соответствует медленным ионам, для которых выполняется условие $v < v_0$, что эквивалентно удельным энергиям порядка 10 кэВ/нуклон и ниже. В этом режиме налетающая частица движется медленнее валентных электронов среды и эффективно захватывает электроны на свои вакантные орбитали, стремясь к состоянию нейтрального атома. Взаимодействие с атомами мишени здесь носит преимущественно упругий характер (ядерное торможение). Энергия иона расходуется на непосредственную передачу импульса ядрам решетки, смещение атомов из узлов, генерацию каскадов точечных дефектов и распыление поверхности [4, 6, 7, 76-89]. Плотность выделяемой энергии в этом режиме, как правило, недостаточна для коллективного разогрева решетки в глубине образца, что делает этот диапазон менее значимым для задач генерации объемных АВ, рассматриваемых в главе III.

Второй диапазон охватывает скорости, значительно превышающие скорость v_0 ($v \gg v_0$), что соответствует удельным энергиям от 1 МэВ/нуклон до нескольких сотен МэВ/нуклон. Именно к этому диапазону относятся БТИ, динамика теплового воздействия которых является предметом исследования в Главе II [10, 13, 14, 22, 26-32, 49, 90]. При движении с такими скоростями ион теряет большую часть своих орбитальных электронов, приобретая высокий эффективный заряд, близкий к заряду ядра. Взаимодействие такого многозарядного иона с веществом происходит главным образом за счет неупругих соударений с электронной подсистемой среды, что приводит к интенсивной ионизации и возбуждению атомов вдоль траектории [17, 19, 34, 83].

Третий диапазон характеризуется энергиями выше 1 ГэВ/нуклон ($v \approx c$). В этой области, помимо кулоновского взаимодействия, существенную роль начинают играть эффекты тормозного излучения и ядерные реакции фрагментации [10, 34, 90]. Хотя плотность энергосвечения релятивистских ионов также велика, физика их взаимодействия осложняется квантово-

электродинамическими эффектами, выходящими за рамки тепловых моделей классической конденсированной среды, применяемых в настоящей работе.

Главной особенностью БТИ (второй диапазон) является их способность передавать колоссальную энергию веществу за экстремально короткие времена [45, 88, 89]. Интенсивность этого процесса характеризуется величиной линейных потерь энергии, или тормозной способностью S , определяемой как потеря энергии dE на единице пути dx :

$$S = -\frac{dE}{dx}. \quad (1.2)$$

Для тяжелых ионов, таких как ксенон (Xe), висмут (Bi) или уран (U), величина потерь энергии в твердом теле может достигать значений порядка 10–100 кэВ/нм [10, 80, 86]. Следовательно, при прохождении потока высокоэнергетических частиц в образце происходит выделение значительной энергии, который приводит к ее локальному нагреву до температур в десятки тысяч градусов. В свою очередь, эта область, это локальное энерговыделение является движущей силой для последующих релаксационных процессов и возникновения ТУН [2, 9, 12, 18, 27, 69, 72].

Важной геометрической особенностью прохождения БТИ через вещество является сохранение прямолинейности траектории. Обладая гигантским импульсом, тяжелый ион практически не испытывает упругого рассеяния на легких электронах среды и слабо отклоняется при редких столкновениях с ядрами. Длина пробега таких ионов в металлах составляет десятки микрометров, а их трек представляет собой практически прямую линию [8, 24]. Данное обстоятельство имеет принципиальное значение для математического моделирования, позволяя обоснованно использовать цилиндрическую систему координат с осевой симметрией для описания ТП [27, 39, 47].

Специфика взаимодействия БТИ с металлами кардинально отличается от процессов в диэлектриках. В металлах наличие высокой концентрации свободных электронов препятствует накоплению нескомпенсированного заряда и реализации механизма кулоновского взрыва в чистом виде (за исключением тонких поверхностных слоев или материалов с низкой проводимо-

стью) [13, 36]. Основным каналом диссипации энергии становится тепловой механизм: энергия передается электронной подсистеме, разогревая её, а затем, посредством электрон-фононного взаимодействия, релаксирует в ионную подсистему. Описание этого процесса требует применения подходов неравновесной термодинамики (двухтемпературной модели), что будет подробно рассмотрено в следующих параграфах [1-3, 17, 18, 22, 27, 39].

Процесс диссипации кинетической энергии быстрого тяжелого иона в конденсированной среде описывается величиной полной тормозной способности (S_{total}), которая интегрально характеризует интенсивность взаимодействия налетающей частицы с атомами и электронами мишени. В общем виде полная тормозная способность S_{total} представляет собой суперпозицию двух независимых компонент, обусловленных принципиально различными физическими механизмами рассеяния [4, 75, 77, 79, 80]:

$$S_{total} = S_n + S_e = -\left(\frac{dE}{dx}\right)_n - \left(\frac{dE}{dx}\right)_e, \quad (1.3)$$

где S_n – ядерная тормозная способность, а S_e – электронная тормозная способность. Понимание количественного соотношения между этими слагаемыми в рассматриваемом энергетическом диапазоне является критически важным для корректной формулировки функции источника тепла в уравнениях теплопроводности (Глава II) и волновых уравнениях (Глава III) [28, 53, 69, 72, 73].

Ядерное торможение S_n играет доминирующую роль в области низких скоростей иона ($v < v_0$). Физическая природа этого механизма заключается в упругих кулоновских столкновениях налетающего иона с ядрами атомов мишени, экранированными своими электронными оболочками. В таких актах взаимодействия, кинематически подобных соударению твердых сфер, происходит передача значительного импульса и смещение атомов из узлов кристаллической решетки. Именно ядерные потери ответственны за генерацию первичных радиационных дефектов (пар Френкеля), каскадов атомных смещений и имплантацию примеси в конце пробега частицы [7, 42, 76, 85]. Од-

нако плотность энергии, выделяемой через этот канал на основном участке траектории быстрого иона, ничтожно мала по сравнению с полной энергией частицы и пространственно она распределена достаточно диффузно.

Электронное торможение S_e , напротив, обусловлено неупругим рассеянием иона на электронной подсистеме среды. Для БТИ ($v \gg v_0$), являющихся объектом исследования данной работы, этот механизм является абсолютно преобладающим [19, 24, 82, 84]. Пролетая сквозь кристаллическую решетку, многозарядный ион своим мощным электрическим полем вызывает ионизацию внутренних оболочек и возбуждение коллективных колебаний (плазмонов) в газе свободных электронов. Величина S_e для тяжелых ионов (Xe, Kr, Bi, U) в типичных конструкционных металлах (Fe, Ni, W) может достигать значений 10–80 кэВ/нм [41, 45, 46].

Сопоставление величин S_e и S_n для области высоких энергий демонстрирует кардинальное различие в их вкладах. Как показывают расчеты с использованием кодов SRIM, базирующихся на методе Монте-Карло, величина электронных потерь превышает ядерные потери на два-три порядка (в 10^2 – 10^3 раз). Например, для иона урана с энергией 700 МэВ в никелевой

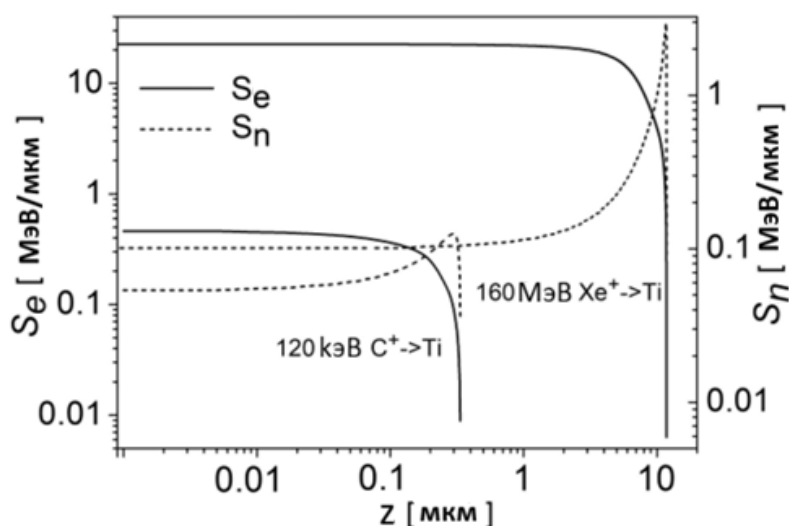


Рис. 1.1. Распределение потерь энергии ионов на электронное (S_e , слева) и ядерное (S_n , справа) торможения энергетических потерь ионов углерода и ксенона в мишени по глубине пробега в титане (Ti) [91].

мишени доля ядерных потерь составляет менее 0.5% [80, 86]. На Рис. 1.1 представлена зависимость электронных (S_e) и ядерных (S_n) энергетических потерь ионов углерода и ксенона от глубины их проникновения в титановую мишень. Существенное различие в пространственном распределении этих потерь позволяет внести ключевое упрощение в математическую модель процессов тепловыделения $S_{total} \approx S_e$.

В контексте задач Главы II и Главы III это означает, что мы можем пренебречь вкладом ядерных столкновений в генерацию тепла. Нагрев решетки в уравнениях математической физики рассматривается исключительно как результат релаксации энергии, первоначально переданной в электронную подсистему [37-40]. Функция источника, $A(r, t)$, в правой части уравнения теплопроводности нормируется только на величину электронных потерь [47]. Ядерное торможение становится значимым лишь в самом конце пробега иона (в зоне брэгговского пика остановки), где оно формирует дефекты структуры, однако для описания генерации ударных волн на основном (высокоэнергетичном) участке трека его термодинамический вклад несущественен.

Важной характеристикой продольного профиля энерговыведения является зависимость потерь от глубины проникновения z , описываемая кривой Брэгга. Для БТИ зависимость $S_e(z)$ имеет характерную форму с относительно пологим участком при высоких скоростях и резким спадом после прохождения максимума. При численном моделировании воздействия ионов на тонкие металлические мишени (толщиной порядка 10–50 мкм), как это делается в ряде постановок задач, часто допустимо использовать приближение постоянных потерь энергии, считая функцию источника однородной вдоль оси z . Однако для корректного описания полей напряжений в массивных образцах необходимо учитывать полный профиль $S_e(z)$, рассчитываемый по таблицам SRIM и интерполируемый для численных схем [79, 86].

Для построения адекватной математической модели теплофизических процессов, рассматриваемых в Главе II, необходимо строгое количественное

определение функции источника энергии [37, 39]. Базовой величиной, определяющей интенсивность тепловой нагрузки на материал, является электронная тормозная способность S_e . Для быстрых заряженных частиц, скорость которых значительно превышает скорость орбитальных электронов ($v \gg v_0$), потери энергии на ионизацию и возбуждение атомов среды описываются классической теорией, основу которой составляет формула Бете-Блоха. В своем каноническом виде, без учета релятивистских поправок и эффектов плотности, она выражает зависимость потерь от скорости иона v и его заряда Z :

$$-\left(\frac{dE}{dx}\right)_e = \frac{4\pi Z^2 e^4 n_e}{m_e v^2} \ln\left(\frac{2m_e v^2}{I}\right), \quad (1.4)$$

где e и m_e – заряд и масса электрона, n_e – концентрация электронов в мишени, I – средний потенциал ионизации атомов среды [75, 79]. Из уравнения (1.4) следует фундаментальная закономерность: потери энергии обратно пропорциональны квадрату скорости частицы ($S_e \sim 1/v^2$). Это указывает на то, что по мере замедления иона в веществе эффективность передачи энергии возрастает, достигая максимума при скоростях, сопоставимых со скоростями валентных электронов [77, 78]. Численный расчет уравнения (1.4) для ионов Xe^+ ($E=250$ МэВ) дает зависимость $(dE/dx)_e$ от глубины z , которая изображена на Рис. 1.2 в виде средней линии [32].

Однако прямое применение классической формулы (1.4) для описания торможения тяжелых ионов требует существенной модификации. В отличие от легких протонов или альфа-частиц, которые движутся в веществе как полностью ионизированные «голые» ядра, тяжелые ионы (например, Ar, Kr, Xe, Bi) сохраняют часть своих орбитальных электронов. В процессе движения ион непрерывно захватывает электроны из среды и теряет их в соударениях, приходя в состояние динамического равновесия, зависящее от его мгновенной скорости [82, 85]. Вследствие этого эффекта экранирования кулоновское поле иона ослабевает, и в формуле (1.4) вместо номинального заряда ядра Z необходимо использовать величину эффективного заряда Z_{eff} [80, 86].

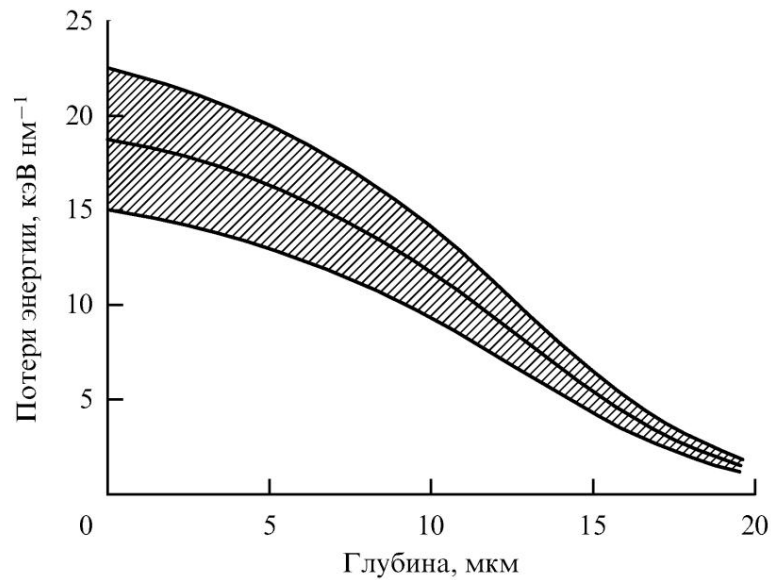


Рис. 1.2. Распределение потерь энергии по глубине для ионов ксенона (Xe^+) с энергией 250 МэВ. Заштрихованная зона демонстрирует диапазон возможных флуктуаций динамического заряда иона [32].

Для расчета Z_{eff} в современной физике ионных пучков используются полуэмпирические аппроксимации, такие как формула Баркаса. Одна из распространенных форм записи имеет вид [31]:

$$Z_{eff} = Z \left[1 - \exp \left(- \frac{v}{v_0 Z^{2/3}} \right) \right], \quad (1.5)$$

Учет эффективного заряда является критически важным этапом подготовки входных данных для моделирования: пренебрежение этим фактором приведет к существенному завышению расчетной плотности энерговыделения и, как следствие, к неверной оценке амплитуды термоупругих волн в Главе III [53, 69, 70, 73].

Важнейшей характеристикой пространственного распределения потерь энергии по глубине мишени z является кривая Брэгга. Как показано на Рис. 1.1, профиль энерговыделения $S_e(z)$ для тяжелых ионов имеет специфическую форму: протяженное «плато» с относительно медленным изменением потерь на начальном участке траектории (высокие энергии) и ярко выраженный максимум - пик Брэгга, в конце пробега, где скорость иона падает, а сечение ионизации возрастает [79, 80]. В узкой зоне пика Брэгга плотность вы-

деляемой энергии может в несколько раз превышать значения на поверхности образца.

Понимание формы кривой Брэгга определяет выбор геометрии задачи в Главе II. При моделировании воздействия БТИ на тонкие металлические плёнки (толщиной 10–30 мкм), что характерно для многих экспериментов, часто используется приближение постоянных потерь энергии ($S_e \approx \text{const}$). Это обосновано тем, что на толщине плёнки, значительно меньшей полного пробега иона, изменение его скорости невелико, и мы работаем на «плато» кривой Брэгга [49]. Такое допущение позволяет считать функцию источника однородной вдоль оси z и сводить задачу теплопроводности к двумерной (r, t) постановке. Однако при исследовании процессов в массивных мишенях учет профиля $S_e(z)$ и локализации пика Брэгга становится обязательным, так как именно в этой зоне возникают максимальные градиенты температуры [35].

Практический расчет величины $S_e(z)$ для конкретных пар «ион-мишень» (например, ионы урана в никеле) проводится с использованием программных кодов типа SRIM, основанных на методе Монте-Карло [86, 92]. Полученные табличные данные аппроксимируются сглаживающими функциями (сплайнами) и используются в качестве множителя в функции источника $A(r, z, t)$ при численном решении системы уравнений МТП [37-40], которому более детально приведем в следующем разделе § 1.2.

Для построения корректной численной модели тепловых процессов в Главе II недостаточно знать лишь интегральную величину потерь энергии S_e . Необходимо детальное понимание того, как эта энергия распределяется в пространстве вокруг траектории иона и во времени. В макроскопическом масштабе трек иона представляется геометрической линией, однако на нанометровом уровне, значимом для формирования температурных градиентов, он обладает сложной радиальной структурой [8, 21, 24]. Эта структура определяется кинетикой вторичных электронов (дельта-электронов), генерируемых в актах первичной ионизации при пролете тяжелого иона [93].

В радиальном распределении плотности энергии принято выделять две характерные области. Первая, ядро трека, представляет собой узкую цилиндрическую область радиусом порядка 1–5 нм, непосредственно прилегающую к траектории движения иона. Здесь происходит первичная ионизация и возбуждение плазмонов, создавая область с экстремально высокой плотностью энергии. Вторая область, гало, простирается на расстояния до сотен нанометров и формируется каскадами высокоэнергетических дельта-электронов, выбитых из атомов и покинувших область ядра. Именно кинетическая энергия этих электронов определяет радиальный профиль дозы на периферии трека [33, 21, 93].

Процесс диссипации колоссальной плотности энергии, введенной БТИ в металлическую мишень, не является одномоментным актом, а представляет собой сложную последовательность событий, разворачивающихся на различных временных масштабах. Понимание этой временной структуры является фундаментальным условием для применимости термодинамических моделей, таких как МТП [18, 27, 17, 72], используемая в Главе II. Эволюцию возбужденного состояния в металле принято разделять на три последовательные стадии: физическую, электронную (кинетическую) и тепловую (стадию электрон-фононной релаксации), каждая из которых характеризуется своим доминирующим механизмом взаимодействия [1, 28].

Первая стадия, физическая, охватывает интервал времени от момента пролета иона ($t = 0$) до примерно 10^{-15} с. В этот период происходит непосредственное взаимодействие кулоновского поля движущегося иона с электронами среды, приводящее к ионизации и генерации спектра первичных возбужденных электронов, включая высокоэнергетичные дельта-электроны. На этой стадии система находится в состоянии глубокой неравновесности, функции распределения электронов по энергиям носят сугубо нетепловой, баллистический характер, и понятие «температуры» к системе в этот момент неприменимо [22, 94].

Вторая стадия, электронная термализация, начинается сразу после прохождения иона. Характерная длительность этой стадии определяется временем электрон-электронной релаксации τ_{ee} , которое в рассматриваемых условиях имеет порядок $10^{-14} - 10^{-13}$ с. Главным физическим механизмом здесь выступают интенсивные электрон-электронные столкновения. Благодаря высокой концентрации носителей заряда в металлах ($n_e \sim 10^{22} - 10^{23}$ см⁻³), частота таких столкновений чрезвычайно велика. В ходе этого процесса энергия, первоначально сосредоточенная у небольшого числа высокоэнергетических электронов, перераспределяется между всеми электронами проводимости в зоне возбуждения. Ключевым итогом этой стадии является установление квазиравновесного распределения Ферми-Дирака внутри электронной подсистемы, что позволяет ввести понятие электронной температуры T_e [29].

Завершение стадии термализации ($t > \tau_{ee}$) знаменует собой принципиально важный момент: с этого времени хаотическое движение множества электронов может быть корректно описано макроскопическим термодинамическим параметром T_e , достигающим в ядре трека значений $10^4 - 10^5$ К. Однако кристаллическая решетка в этот период все еще остается «холодной», сохраняя температуру, близкую к начальной температуре образца T_0 , поскольку массивные ионы не успевают среагировать на быстрые движения легких электронов за столь короткое время. Этот эффект запаздывания нагрева решетки является ключевым для понимания динамики возникновения напряжений [28].

Третья стадия, электрон-фононная релаксация, является наиболее длительной и определяет динамику нагрева материала. Она начинается на временах порядка 10^{-13} с и продолжается до $10^{-12} - 10^{-11}$ с (единицы-десятки пикосекунд). На этом этапе происходит передача избыточной тепловой энергии от горячего электронного газа к холодной ионной решетке посредством неупругого рассеяния электронов на колебаниях решетки (фононах). Характерное время выравнивания температур электронной и ионной подсистем τ_{ep}

определяется теплоемкостью электронов C_e и константой электрон-фононного взаимодействия g согласно соотношению [22, 32, 45]:

$$\tau_{ep} \approx \frac{C_e}{g} \quad (1.6)$$

Это время для переходных металлов (Ni, Fe) составляет порядка нескольких пикосекунд [1].

Фундаментальным обоснованием использования МТП, которая будет детально описана в § 1.2, является существование строгого неравенства между временами релаксации: $\tau_{ee} \ll \tau_{ep}$. Именно наличие временного «окна» между моментом установления равновесия в электронной подсистеме и моментом нагрева решетки позволяет рассматривать металл как систему двух взаимодействующих термодинамических континуумов с различными температурами T_e и T_i в одной пространственной точке. В рамках классических теорий Каганова-Лифшица, такой подход является единственно верным способом описания кинетики сверхбыстрого нагрева, приводящего к возникновению ударных термоупругих волн [1-3].

1.2. Теоретические модели тепловой релаксации в металлах:

модель термического пика и двухтемпературное приближение

Разработка адекватного математического аппарата для описания теплофизических процессов в металлах, облучаемых БТИ, требует кардинального пересмотра классических представлений о теплопроводности [44, 45, 53, 57, 95, 96]. Исторически первые попытки объяснить радиационные эффекты в твердых телах базировались на концепции «тепловой вспышки», предложенной Зейтцем и Келером в середине 50-х годов [76, 97].

В рамках этого раннего подхода предполагалось, что кинетическая энергия налетающей частицы мгновенно трансформируется в тепловую энергию решетки, создавая локальную область высокой температуры, которая затем остывает согласно классическому закону Фурье [7, 9, 76, 98]. Однако для металлов, подвергающихся воздействию сверхкоротких импульсов (фемто-

секундные лазеры или БТИ), такое приближение оказывается физически несостоятельным. Фундаментальным ограничением классической теории является гипотеза о локальном термодинамическом равновесии, которое, как следует из анализа времен релаксации, нарушается на временах взаимодействия $t < 10^{-12}$ с [1, 28, 30, 45, 99-101].

Специфика металлов как термодинамической системы заключается в наличии двух слабосвязанных подсистем: вырожденного газа свободных электронов и ионной кристаллической решетки. При прохождении быстрого тяжелого иона, как было отмечено в § 1.1, энергия передается исключительно электронной подсистеме ($S_e \gg S_n$) [17, 22, 47]. Вследствие малой теплоемкости электронного газа C_e по сравнению с теплоемкостью решетки C_i (отношение $C_e/C_i \sim 10^{-2}$), температура электронов T_e в области трека мгновенно возрастает до значений порядка $10^4 - 10^5$ К, в то время как решетка остается «холодной» ($T_i \approx 300$ К). Классическое однотемпературное уравнение теплопроводности неспособно описать это сильно неравновесное состояние, когда в одной пространственной точке сосуществуют две различные температуры [28]. Для разрешения этого противоречия Кагановым, Лифшицем и Танатаровым была сформулирована микроскопическая теория релаксации энергии между электронами и решеткой, ставшая основой современного двухтемпературного приближения [1-3]. Согласно этой теории, процесс выравнивания температур лимитируется скоростью неупругого рассеяния электронов на колебаниях решетки (фононах). Поскольку масса электрона m_e много меньше массы иона решетки M_{ion} , доля энергии, передаваемой в одном акте столкновения, крайне мала ($\sim m_e/M_{ion}$), что делает макроскопический процесс передачи тепла относительно длительным (пикосекундный диапазон). В модели вводится объемный источник энергообмена, пропорциональный разности температур подсистем и константе электрон-фононного взаимодействия g [1, 30, 31, 45].

Интенсивность обмена энергией определяется параметром g , который зависит от микроскопических свойств металла (концентрации электронов,

скорости звука, времени релаксации). Теоретическая оценка этого параметра может быть получена из выражения:

$$g = \frac{\pi^2 m_e n_e v_s^2}{6 \tau_e(T_e)}, \quad (1.7)$$

где n_e – концентрация электронов, v_s – скорость звука, τ_e – среднее время свободного пробега электронов [1, 22, 28, 31, 45]. В современных вариациях модели для БТИ параметр g часто рассматривается как феноменологическая константа или функция температуры, определяемая из сравнения численных расчетов с экспериментальными данными по радиусам треков [17, 22, 29, 41, 47].

Применение двухтемпературного подхода для задач, решаемых в Главе II, обосновано конкуренцией двух процессов: радиального расплывания тепла в электронной подсистеме и передачи энергии в решетку [39, 72]. Высокая электронная теплопроводность $\kappa_e(T_e)$ способствует быстрому выносу энергии из зоны возбуждения, снижая пиковую температуру. Эффективность трекообразования и генерации ударных волн (Глава III) зависит от того, успеет ли электронный газ передать достаточную энергию решетке до того, как остынет за счет диффузии. В металлах с высокой проводимостью (Au, Cu) электронный газ успевает рассеять энергию, и треки не образуются. В металлах с сильной электрон-фононной связью (Fe, Ti, Zr) энергия локализуется, вызывая интенсивный разогрев решетки и возникновение сильных ТУН [22, 35, 43, 73].

Таким образом, использование ДТМ является не просто уточнением, а физической необходимостью для корректного моделирования воздействия БТИ на металлы. Отказ от этого приближения в пользу однотемпературной модели привел бы к физически неверному результату: либо к недооценке локальной температуры решетки (из-за усреднения энергии по всему объему), либо к игнорированию временной задержки нагрева, которая является ключевой причиной возникновения динамических напряжений и АВ, рассматриваемых в [50, 69, 71, 72].

Переход от качественного физического описания релаксационных процессов к их количественному анализу требует строгой математической формализации в рамках механики сплошной среды. Базовой математической моделью, описывающей пространственно-временную эволюцию ТП в металле при воздействии ультракоротких тепловых импульсов, является система двух связанных нелинейных дифференциальных уравнений параболического типа [31, 40]. Этот подход, впервые сформулированный в фундаментальных работах Каганова, Лифшица и Танатарова, базируется на представлении облучаемого вещества как совокупности двух взаимодействующих континуумов – электронного газа и ионной решетки. Каждая из подсистем характеризуется собственной температурой (T_e и T_i), теплоемкостью (C_e и C_i) и теплопроводностью (κ_e и κ_i), а обмен энергией между ними описывается объемным источником, пропорциональным разности температур [1, 3, 31, 40]. Система уравнений имеет следующий вид [1, 17, 22, 31, 45, 47, 49]:

$$C_e(T_e) \frac{\partial T_e}{\partial t} = \nabla(\kappa_e(T_e) \nabla T_e) - g(T_e - T_i) + A_e(r, t, z) \quad (1.8. a)$$

$$C_i(T_i) \frac{\partial T_i}{\partial t} = \nabla(\kappa_i(T_i) \nabla T_i) + g(T_e - T_i) + A_i(r, t, z), \quad (1.8. б)$$

где A_e , A_i – объемная плотность вносимой ионом мощности в электронную подсистему и атомную решетку соответственно.

Первое уравнение описывает изменение внутренней энергии электронной подсистемы за счет теплопроводности, обмена с решеткой и внешнего источника $A_e(r, t)$. Второе уравнение описывает нагрев решетки, который происходит исключительно за счет притока энергии от электронов (поскольку непосредственным взаимодействием иона с решеткой S_n мы пренебрегаем, как обосновано в § 1.1).

Плотность выделяемой энергии в единицу времени $A(r, t, z)$. В системе уравнений (1.8), величина A_i является достаточно малой величиной по сравнению с A_e и ими в большинство случаев пренебрегается [22, 31, 45]. Функция источника $A_{e,i}(r, t, z)$ задается в соответствии с формулами согласно научных работах [22, 31, 37-40, 44-47, 103-105].

Временная зависимость функции источника определяется длительностью взаимодействия иона с веществом. Поскольку скорость БТИ огромна ($v \sim 10^7$ м/с), время пролета характерного межатомного расстояния составляет аттосекунды, что можно считать мгновенным воздействием по сравнению с временами релаксации решетки (пикосекунды). Однако для целей численного моделирования и обеспечения устойчивости разностных схем вводится конечное время действия источника, имитирующее длительность процесса электронной термализации. Временная функция $f(t)$ также выбирается в форме Гаусса [18, 22, 31, 37-40, 45, 47, 102]:

$$f(t) = \exp\left(-\frac{(t - t_0)^2}{2\sigma_t^2}\right), \quad (1.9)$$

где t_0 – среднее время пролета дельта-электронов, имеющее порядок 10^{-15} с. Величина t_0 может быть выбрана в диапазоне от 10^{-15} до 5×10^{-15} с без какого-либо влияния на радиус зоны расплава [18, 22, 31]. Полуширина распределения Гаусса σ_t принимается равной t_0 .

Для аналитического описания распределения поглощенной дозы $D(r)$ в зависимости от расстояния r до оси трека в микродозиметрии широко используется полуэмпирическая модель Валигорского [93], предсказывающая спадание плотности энергии по степенному закону, близкому к $1/r^2$. Однако наличие математической сингулярности при $r \rightarrow 0$ делает эту формулу неудобной для непосредственного использования в дифференциальных уравнениях теплопроводности. В рамках МТП, применяемой в данной диссертации, более физически обоснованным подходом является использование экспоненциально затухающим [31, 37-40, 45, 47, 103] или Гауссовой аппроксимации начального распределения энергии [104, 105]. Экспоненциально затухающий профиль позволяет адекватно описать радиальное распределение плотности выделенной энергии вблизи траектории движения иона, учитывая первичные акты ионизации, а Гауссовый профиль позволяет учесть стохастический характер процессов рассеяния и диффузное расплывание энергии в электронной подсистеме на стадии термализации, устраняя проблему сингулярности

на оси симметрии [18, 28, 39, 47]. Пространственная часть функции источника $D(r)$ в цилиндрических координатах задается выражением [31, 32, 37-40, 45, 47, 103]:

$$D(r) = \exp\left(-\frac{r}{r_0}\right) \quad (1.10)$$

где r_0 – эффективный радиус начальной области электронного возбуждения. Этот параметр является ключевой величиной модели, характеризующей ширину области, в которой локализуется порядка 66% выделенной энергии. Значение r_0 зависит от скорости иона и свойств материала и часто выступает в качестве подгоночного параметра при сопоставлении результатов моделирования с экспериментом [28, 29, 79].

Выбор параметров функции (1.10) осуществляется на основе сопоставления результатов численного моделирования с экспериментальными данными. В частности, пространственный параметр r_0 часто выступает в качестве подгоночного, варьируемого до достижения соответствия между расчетным диаметром зоны расплава и размерами треков, наблюдаемых в экспериментах по просвечивающей электронной микроскопии высокого разрешения [21, 24, 31]. Морфология этой структуры определяется кинетикой вторичных электронов (дельта-электронов), генерируемых в актах первичной ионизации. В радиальном распределении плотности выделяемой энергии принято выделять две характерные области: ядро трека (радиусом порядка 1–5 нм), где плотность возбуждения максимальна, и гало, простирающееся на сотни нанометров и сформированное высокоэнергетичными электронами [21, 24, 80–86].

Более того, для построения корректного моделирования тепловых процессов недостаточно оперировать лишь интегральной величиной электронных потерь энергии dE/dx (S_e). Необходимо детальное описание пространственно-временной диссипации этой энергии вокруг траектории иона. В микроскопическом масштабе трек иона представляется геометрической линией, однако на нанометровом уровне, определяющем формирование температур-

ных градиентов, он обладает сложной внутренней структурой [8, 46]. Зависимость функции источника $A(r, z, t)$ от глубины проникновения z , которая пропорциональна тормозной способности $S_e(z)$, представлена в выражении (1.4).

Объединяя временную и пространственную компоненты, полная функция источника тепла $A_e(r, z, t)$, входящая в правую часть уравнения теплопроводности для электронной подсистемы в (1.8.a), принимает следующий вид [18, 22, 31, 37-40, 45, 47, 102]:

$$A_e(r, z, t) = bS_e \exp\left(-\frac{(t - t_0)^2}{2t_0^2}\right) \exp\left(-\frac{r}{r_0}\right) \mu(z).$$

Здесь b – нормировочная константа, r_0 – пространственная ширина высоко-возбужденных области, S_e – профиль ионизационных потерь иона, $\mu(z)$ – функция профиль ионизационных потерь энергии иона $S_e(z)$, нормированный на ионизационные потери энергии E на входе в мишень S_e [37-40]:

$$\mu(z) = S_e(z)/S_e, \quad S_e(z) = dE/dz, \quad S_e = S_e(z = 0).$$

Поскольку линейные потери энергии связаны с параметрами пучка соотношением $S_e = E_0/L_p$ (где E_0 – начальная энергия иона, а L_p – длина его пробега), интенсивность источника тепловыделения можно выразить через начальную энергию падающего иона.

Значение константы b определяется из условия нормировки [22, 31, 45]:

$$\int_{t=0}^{\infty} dt \int_{r=0}^{\infty} 2\pi r dr \int_{z=0}^{L_p} A_e(r, z, t) dz = E_0. \quad (1.11)$$

Интеграл от функции $A_e(r, z, t)$ по всему объему и времени должен быть строго равен полной энергии E_0 , потерянной ионом.

Корректное задание функции источника является важным условием для последующего расчета ТУН (в Главе III), так как именно градиенты температуры, создаваемые этим источником, служат генератором АВ [12, 69, 71]. В работах [44, 87-89] предложено аналитическую форму функции источника $A_e(r, t)$ для БТИ в следующем виде:

$$A_e(r, t) = bS_e \exp(-\alpha t) \frac{1}{r} \exp\left(-\frac{r}{r_0}\right), \quad (1.12)$$

где $\alpha = 1/t_0$.

Более того, в недавних работах [103, 104] было предложено использовать аналитическую форму функции источника $A_e(r, t)$ для БТИ, представив ее в следующем виде:

$$A_e(r, t) = bS_e \exp(-\alpha t) \exp\left(-\frac{r^2}{r_0^2}\right), \quad (1.13)$$

Такие виды функции источника (1.11) - (1.13) обеспечивают выполнение закона сохранения энергии в модели и позволяет корректно моделировать сверхбыстрый локальный разогрев, являющийся причиной возникновения термоупругих волн [37, 39, 56, 103].

Для специфической задачи моделирования треков БТИ общая трехмерная постановка (1.8) является избыточной и вычислительно неэффективной. Физика процесса прохождения высокоэнергетического иона через вещество диктует наличие выраженной аксиальной симметрии [8, 21, 22, 24]. Траектория иона представляет собой прямую линию, которую естественно выбрать в качестве полярной оси z цилиндрической системы координат (r, ϕ, z) . В силу изотропности свойств поликристаллического металла и осевой симметрии начального энерговыведения, ТП не зависят от азимутального угла ϕ . Это позволяет свести задачу к двумерной (r, z) или даже одномерной (r) постановке, что существенно упрощает численный анализ [7, 22, 31, 39, 45-47].

С учетом цилиндрической симметрии и предположения о том, что продольные градиенты температуры $\partial T / \partial z$ (вдоль трека) пренебрежимо малы по сравнению с радиальными градиентами $\partial T / \partial r$ (поперек трека), оператор набла ∇ раскрывается через радиальную часть. Такая аппроксимация, часто называемая приближением цилиндрического теплового всплеска, справедлива для большей части трека, за исключением зон вблизи поверхности и конца пробега [9, 17, 18, 35, 37, 44-49].

Система уравнений (1.8) трансформируется к виду, используемому в большинстве расчетных работ [31, 49, 101]:

$$C_e(T_e) \frac{\partial T_e}{\partial t} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \kappa_e(T_e) \frac{\partial T_e}{\partial r} \right) - g(T_e - T_i) + A_e(r, t) \quad (1.14. a)$$

$$C_i(T_i) \frac{\partial T_i}{\partial t} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \kappa_i(T_i) \frac{\partial T_i}{\partial r} \right) + g(T_e - T_i) \quad (1.14.6)$$

Ключевой особенностью физической постановки задачи моделирования треков БТИ является необходимость учета сильной температурной зависимости теплофизических параметров среды. Поскольку в начальный момент времени энергия иона локализуется исключительно в электронной подсистеме, температура электронного газа T_e может достигать значений порядка $10^4 - 10^5$ К, что соответствует энергиям 1-10 эВ. В этом диапазоне использование стандартных значений теплоемкости и теплопроводности, измеренных при комнатной температуре, является физически некорректным и приводит к существенным ошибкам в определении радиусов расплавленных зон и амплитуд генерируемых волн давления. Как показано в классических работах по двухтемпературной модели, игнорирование температурных зависимостей делает невозможным количественное согласование результатов моделирования с экспериментальными данными по дефектообразованию [22, 28, 29, 41, 101].

С другой стороны, важно подчеркнуть, что строгий учет температурной зависимости этих параметров приводит к колоссальному усложнению системы уравнений, делая их точное аналитическое решение практически невозможным. Тем не менее, путем введения корректных аппроксимаций в исходные уравнения, эту математическую трудность можно преодолеть. Такой подход позволяет успешно исследовать данные эффекты аналитическими методами, полностью сохраняя при этом физический смысл и адекватность описания протекающих процессов.

Электронная удельная теплоемкость $C_e(T_e)$. Теплоемкость электронной подсистемы C_e в металлах является функцией температуры и подчиняется квантовой статистике Ферми-Дирака. При температурах, значительно меньших температуры Ферми ($T_e \ll T_F$, где $T_F \sim 10^5$ К), электронный газ считается вырожденным. Энергия Ферми определяется выражением $E_F = \frac{\hbar^2 (3\pi^2 n_e)^{2/3}}{2m_e}$. В этом режиме, согласно теории Зоммерфельда, в тепловое

возбуждение вовлекаются только электроны, находящиеся в узком энергетическом слое $k_B T$ вблизи поверхности Ферми. Это приводит к линейной зависимости теплоемкости от электронной температуры:

$$C_e(T_e) = \gamma T_e \quad (1.15)$$

где γ – постоянная Зоммерфельда, являющаяся характеристикой конкретного металла и пропорциональная плотности электронных состояний на уровне Ферми $\gamma = (\pi^2 2k_B^2 n_e / 2E_F) T_e$, где k_B и $\hbar$ – постоянные Больцмана и Планка соответственно. Однако при сверхвысоких температурах, приближающихся к T_F , вырождение снимается, и зависимость $C_e(T_e)$ отклоняется от линейной, выходя на насыщение и стремясь к классическому значению $C_e = 3/2 n_e k_B$ для идеального газа. В численных алгоритмах, используемых для решения задач Главы II, обычно применяется линейное приближение, если температура в пике не превышает T_F [1, 14, 22, 31].

Электронная теплопроводность $\kappa(T_e)$. Коэффициент электронной теплопроводности κ_e играет определяющую роль в пространственной динамике диссипации энергии из области трека. Он контролирует скорость радиального расплывания тепла и, следовательно, определяет, какая доля энергии успеет передаться решетке до остывания электронного газа. В рамках кинетической теории κ_e связана с теплоемкостью, скоростью Ферми v_F и средней длиной свободного пробега λ соотношением $\kappa_e = 1/3 C_e v_F \lambda$. Поскольку теплоемкость растет с температурой ($C_e \sim T_e$), а длина пробега уменьшается из-за рассеяния носителей, поведение коэффициента теплопроводности является сложным и немонотонным. В области температур, характерных для треков БТИ, преобладает механизм рассеяния электронов на ионах решетки (электрон-фононное рассеяние) и на других электронах [1, 11, 42]. Для корректного моделирования часто используется аппроксимация, учитывающая температуры обеих подсистем:

$$\kappa_e(T_e, T_i) = \kappa_0 \frac{T_e}{T_i} \quad (1.16)$$

Это соотношение отражает физический эффект «теплового запираения»: при нагреве решетки (T_i растет) амплитуда колебаний ионов увеличивается,

что снижает длину свободного пробега электронов и уменьшает теплопроводность, способствуя локализации энергии в центре трека [34, 47, 51, 68].

Теплофизические свойства ионной подсистемы (решетки) – теплоемкость $C_i(T_i)$ и теплопроводность $\kappa_i(T_i)$ – также изменяются в процессе нагрева, хотя и не столь сильно, как электронные параметры. Теплоемкость решетки описывается моделью Дебая, выходя на постоянное значение $3nk_B$ (закон Дюлонга-Пти) при температурах выше температуры Дебая Θ_D . При моделировании фазовых переходов (плавления) в рамках МТП также необходимо учитывать скрытую теплоту плавления, что реализуется либо через введение эффективной теплоемкости в узком интервале температур, либо через метод энтальпии [16-18, 39, 47]. Учет этих нелинейностей критически важен для точного расчета давления $\sigma(r, t)$, которое является функцией локальной температуры решетки и плотности [56, 71].

Коэффициент электрон-фононного взаимодействия g . Параметр g определяет скорость обмена энергией между электронной и фононной подсистемами в системе уравнений (1.14) и зависит от макроскопических параметров среды. В теоретических расчетах для металлов при температурах решетки не существенно ниже температуры Дебая (Θ_D) используется формула (1.7), либо значение g связывается со временем релаксации τ_{ep} соотношением $g = C_e / \tau_{ep}$ [22, 31, 106, 107]. Для переходных металлов (Fe, Ni, W, Ti) значение g велико ($10^{17} - 10^{18}$ Вт/(м³К)), что обеспечивает эффективный нагрев решетки и формирование треков даже при высокой теплопроводности. Для металлов с высокой проводимостью (Au, Cu) значение g на порядок меньше, что затрудняет образование треков [22, 35, 43]. В большинстве численных моделей, включая работы Амирханова и соавторов [37, 38, 40, 50, 72], параметр g на этапе первого приближения рассматривается как константа материала, однако существуют усложненные модели, учитывающие зависимость $g(T_e)$ через изменение плотности состояний.

Использование МТП для описания релаксационных процессов в треках БТИ имеет четкие физические границы применимости, определяемые соот-

ношением временных масштабов и энергетических параметров [17, 18]. Фундаментальным критерием корректности модели является выполнение условия $\tau_{ee} \ll \tau_{ep}$, то есть время установления локального термодинамического равновесия в электронной подсистеме должно быть значительно меньше времени передачи энергии в решетку. Для большинства металлов это условие выполняется с большим запасом: термализация электронов завершается за 10^{-14} с, тогда как электрон-фононная релаксация длится 10^{-12} – 10^{-11} с. Это позволяет рассматривать электронный газ как квазиравновесную термодинамическую систему с определенной температурой $T_e(r, t)$ на всем протяжении процесса нагрева решетки [1, 2, 22, 29].

Однако существует ограничение, связанное с плотностью выделяемой энергии. В случае воздействия релятивистских ионов или сверхмощных лазерных импульсов температура электронов может достигать значений, при которых энергия Ферми E_F становится сопоставимой с тепловой энергией $k_B T_e$. В этом режиме («горячие электроны») необходим учет зависимости химического потенциала от температуры и использование полных интегралов Ферми для расчета теплоемкости, а не их низкотемпературных разложений [100, 101]. Для задач, рассматриваемых в данной диссертации (ионы с энергией ~ 1 – 10 МэВ/нуклон), максимальная электронная температура соответствует $k_B T_e \sim 5$ – 10 эВ (что эквивалентно $T_e \sim (6$ – $12) \times 10^4$ К) температура электронов редко превышает 5–10 эВ, что позволяет оставаться в рамках приближения вырожденного или частично вырожденного газа, не прибегая к сложным кинетическим уравнениям Больцмана [28, 39].

Математической особенностью системы (1.14) является ее жесткость, обусловленная колоссальным различием в коэффициентах температуропроводности электронной и ионной подсистем ($\chi_e \gg \chi_i$) и малым характерным временем релаксации. Это накладывает серьезные ограничения на выбор аналитических методов решения. Поэтому для решения таких задач обычно применяются неявные или консервативные разностные схемы, позволяющие

корректно описывать быстрые процессы теплообмена при сохранении общей энергии системы [37-40].

В большинстве расчетных работ, посвящённых МТП, система уравнений (1.8) подвергается дальнейшему упрощению. В частности, вследствие существенно более высокой электронной теплопроводности по сравнению с теплопроводностью решётки ($\kappa_e \gg \kappa_i$) диффузионным переносом тепла в ионной подсистеме на пикосекундных временах пренебрегают, что приводит к исключению второго члена в правой части уравнения для T_i [100]. Кроме того, ввиду значительного превышения теплоёмкости решётки над электронной теплоёмкостью ($C_i \gg C_e$) на начальной стадии релаксации часто опускается инерционный член в уравнении для электронной подсистемы, что соответствует квазистационарному установлению электронной температуры [101, 105]. Такое приближение позволяет существенно упростить численную реализацию модели и особенно эффективно при проведении аналитических исследований, не приводя при этом к потере адекватности описания динамики передачи энергии от электронов к решётке.

Для обеспечения единственности решения системы дифференциальных уравнений (1.14) необходимо сформулировать начальные и граничные условия, соответствующие физике задачи. В начальный момент времени $t = 0$ (до прихода иона) предполагается, что система находится в термодинамическом равновесии при температуре окружающей среды (термостата) T_0 , которая обычно принимается равной 300 К [1, 35]. Это условие записывается как:

$$T_e(r, 0) = T_i(r, 0) = T_0 \quad (1.17)$$

Такая постановка предполагает отсутствие предварительного нагрева мишени и остаточных ТП от предыдущих ионов, что справедливо для режимов облучения с низкой плотностью тока [14, 23, 26, 83].

Граничные условия задаются на краях расчетной области $r \in [0, R_{max}]$. На оси симметрии ($r = 0$) физическое требование непрерывности и конечности температуры приводит к условию равенства нулю теплового потока (условие Неймана второго рода):

$$\left. \frac{\partial T_{e,i}}{\partial r} \right|_{r=0} = 0 \quad (1.18)$$

На внешней границе $r = R_{max}$ ставится условие Дирихле первого рода, фиксирующее температуру на уровне термостата. Радиус расчетной области R_{max} выбирается достаточно большим (обычно 100–500 нм), чтобы за время моделирования (порядка 100 пс) тепловая волна не достигла границы, что позволяет имитировать бесконечную среду [17, 18].

В рамках МТП на границах образца ($z=0$ и $z=L$) задаются адиабатические граничные условия

$$\frac{\partial T_{e,i}}{\partial z} = 0, \quad (1.19)$$

что подразумевает пренебрежение тепловыми потерями с поверхности [37–40, 108]. Такое допущение широко используется при моделировании сверхбыстрого теплопереноса и физически обосновано двумя ключевыми факторами. Во-первых, длительность импульса пучка и характерное время передачи энергии электронной подсистеме крайне малы (находятся в фемтосекундном диапазоне). За столь короткий промежуток времени металлическая пленка физически не успевает передать сколько-нибудь значимое количество тепла в окружающую среду. Во-вторых, константа электрон-фононного взаимодействия g имеет порядок величины 10^{16} Вт·м³·К), что на много порядков превышает любые коэффициенты внешнего теплообмена. Следовательно, горячий электронный газ передает практически всю свою энергию холодной кристаллической решетке, а не рассеивает ее через поверхность, что позволяет с высокой степенью точности считать границы мишени термически изолированными.

Важным аспектом, связывающим тепловую задачу (Глава II) с механической (Глава III), является вопрос о скорости нагрева решетки. Согласно МТП, скорость роста температуры ионов $\partial T_i / \partial t$ определяется слагаемым $g(T_e - T_i)$. Если эта скорость настолько велика, что характерное время нагрева τ_{heat} оказывается меньше времени механической релаксации $\tau_{mech} = r_0 / v_s$ (где r_0 – радиус трека, v_s – скорость звука), то тепловое расширение вещества

не успевает происходить квазистатически. В результате в зоне трека генерируется избыточное давление $\sigma(r, t)$, которое не успевает разгрузиться и становится источником ударной волны [12, 53, 69, 70]. Для металлов $\tau_{mech} \sim 10^{-13}$ с, что сопоставимо с временами нагрева, поэтому использование связанной системы уравнений термоупругости является обязательным [50, 71, 72, 73].

Таким образом, мы определили физические параметры и коэффициенты, необходимые для решения системы уравнений (1.14) для металлов. В данной схеме двухтемпературная модель – МТП служит необходимым «мостом» между входными параметрами пучка (через функцию источника $A_e(r, t)$) и механическим откликом среды. Результатом решения тепловой задачи является пространственно-временное поле температуры решетки $T_i(r, t)$, которое выступает в роли «силовой нагрузки» в уравнениях движения сплошной среды. Именно градиенты этого поля, а не сам факт нагрева, определяют амплитуду и форму генерируемых АИ.

1.3 Термоупругий механизм генерации акустических волн в металлах при радиационном воздействии

Радиационное воздействие на твердое тело охватывает широкий спектр физических явлений, обусловленных различными типами излучений, однако в контексте генерации АВ в металлах наиболее значимым сценарием является облучение БТИ. В рамках этого вида радиационного воздействия процесс представляет собой сложную многостадийную последовательность, инициируемую сверхбыстрым локальным энерговкладом. [1-3, 12]

При прохождении БТИ через вещество огромная плотность энергии передается электронной подсистеме практически мгновенно, формируя узкую цилиндрическую область сильного локального нагрева [7, 10, 15, 90]. В то время как электроны нагреваются до экстремальных температур, ионная решетка в начальный момент времени остается «холодной», что создает резко неравновесное состояние системы [34]. Релаксация этой энергии происхо-

дит посредством электрон-фононного взаимодействия, приводя к быстрому росту температуры решетки T_i на временах порядка пикосекунд [29, 39].

Физический механизм трансформации тепловой энергии в механическую работу обусловлен эффектом теплового расширения материала. Поскольку нагрев решетки происходит чрезвычайно быстро, расширение вещества встречает инерционное сопротивление окружающей среды [18, 58, 73]. Это противоречие между стремлением к расширению и инерцией приводит к резкому росту локального давления и, как следствие, к возбуждению АВ [53, 54, 56, 70]. Исследование особенностей распространения этих волн позволяет не только понять механизмы энергосвободения, но и использовать их для неразрушающей диагностики материалов [57, 64, 65].

Математическое описание данного процесса базируется на системе уравнений динамической термоупругости. Связь между деформационными полями и ТП решетки T_i описывается функцией свободной энергии деформированного тела [55, 109]. Для изотропной среды, согласно закону Дюамеля-Неймана, компоненты тензора напряжений σ_{ik} выражаются через компоненты тензора деформаций U_{ik} и изменение температуры следующим образом [56, 57, 71, 109]:

$$\sigma_{ik} = -K\beta_V(T_i - T_0)\delta_{ik} + 2\mu\left(U_{ik} - \frac{1}{3}\delta_{ik}U_{ll}\right) + KU_{ll}\delta_{ik}, \quad (1.20)$$

где K – модуль всестороннего сжатия, μ – модуль сдвига, β_V – коэффициент объемного теплового расширения. Именно слагаемое $-K\beta_V(T_i - T_0)$ представляет собой «тепловое давление», выступающее источником механического возмущения [50, 51, 69, 71].

Комбинируя уравнения движения с законом Дюамеля-Неймана, можно получить волновое уравнение, описывающее эволюцию ТУН. В цилиндрической системе координат, с учетом аксиальной симметрии и специфики трека иона, уравнение для ТУН σ принимает вид [61, 63, 68]:

$$\frac{\partial^2 \sigma}{\partial t^2} = v_s^2 \left(\frac{\partial^2 \sigma}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial \sigma}{\partial r} + \frac{\partial^2 \sigma}{\partial z^2} \right) - \gamma \frac{\partial^2 T_i}{\partial t^2}, \quad (1.21)$$

где $v_s = \sqrt{(K + 4\mu/3)/\rho}$ – скорость продольной звуковой волны в среде [59]. Параметр термоупругой связи γ определяется как $\gamma = K\beta_V$ [84]. Источником волны в данном уравнении является вторая производная температуры решетки по времени, что подтверждает волновой характер передачи энергии при импульсном радиационном воздействии [51, 84].

Для решения сформулированной задачи необходимо иметь явное выражение для нестационарного поля температуры решетки $T_i(r, z, t)$, которое находится из системы связанных уравнений теплопроводности МТП [17, 18, 22, 37]. Важно отметить, что граница раздела «мишень – вакуум» (при $z = 0$) обычно считается свободной от напряжений, что приводит к граничному условию $\sigma(z = 0) = 0$ [52, 54, 71]. Это условие вызывает инверсию фазы при отражении волны, в результате чего формируется характерный биполярный АИ, распространяющийся вглубь мишени [58, 69, 70, 73].

Анализ динамики таких волн, представленный в Главе III, показывает, что акустическое возмущение имеет вид узко локализованного импульса сжатия, положение которого строго соответствует координате фронта волны $z = v_s \cdot t$ [53, 58, 69, 71]. Таким образом, теоретическая модель термоупругости в рамках концепции МТП позволяет детально описать формирование нестационарного поля давлений в металлах под действием БТИ [39, 56, 71].

Для количественного описания процессов распространения акустических возмущений необходимо объединить закон Дюамеля-Неймана, приведенное выше, с уравнениями движения сплошной среды. В рамках классической механики континуума, уравнение движения (второй закон Ньютона для элементарного объема) связывает ускорение частиц среды с дивергенцией тензора напряжений и массовыми силами. Подстановка соотношений Дюамеля-Неймана в уравнения движения приводит к системе дифференциальных уравнений в перемещениях, известных как уравнения Ламе для термоупругой среды. В векторном виде, инвариантном относительно системы координат, это уравнение записывается следующим образом [55]:

$$\mu \Delta u + (\lambda + \mu) \nabla (\nabla \cdot u) - K \beta_V \nabla T(r, t) = \rho \frac{\partial^2 u}{\partial t^2}, \quad (1.22)$$

где u – вектор перемещения, ρ – плотность среды, Δ – оператор Лапласа, ∇ – оператор градиента. Третье слагаемое в левой части уравнения ($K \beta_V \nabla T$) играет роль объемной силы, порождаемой неравномерным ТП. Именно градиент температуры ∇T , а не сама температура, является движущей силой, возбуждающей механическое движение [1, 2, 65].

Специфика задачи о треке БТИ, обладающей аксиальной симметрией, позволяет существенно упростить общую векторную постановку (1.22). В цилиндрической системе координат (r, ϕ, z) , при условии, что ось z совпадает с траекторией иона, вектор перемещений u имеет только одну ненулевую компоненту – радиальную $u_r(r, t)$. Тангенциальные перемещения отсутствуют в силу симметрии, а продольными перемещениями вдоль трека в рамках плоско-деформированного состояния (или для длинного трека вдали от торцов) можно пренебречь. В этом случае уравнение (1.22) сводится к одному скалярному гиперболическому уравнению для радиального смещения [12, 50, 69]:

$$\frac{\partial^2 u_r}{\partial t^2} = v_s^2 \left(\frac{\partial^2 u_r}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial u_r}{\partial r} - \frac{u_r}{r^2} \right) - \frac{K \beta_V}{\rho} \frac{\partial T_i(r, t)}{\partial r}, \quad (1.23)$$

Уравнение (1.23) показывает, что источником радиальной волны является производная температуры решетки по радиусу. Это объясняет, почему формирование резкого температурного фронта (большие градиенты) на границе трека приводит к генерации интенсивных ударных волн [55, 58, 73].

Для решения волновых задач термоупругости часто используется метод термоупругого потенциала перемещений $\Phi(r, t)$, который связан с вектором перемещения соотношением $u = \nabla \Phi$. Введение потенциала позволяет свести систему уравнений Ламе к неоднородному волновому уравнению (уравнению Даламбера), что удобно для аналитического и численного анализа. В цилиндрических координатах уравнение для потенциала принимает вид [53, 59, 705]:

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial \Phi}{\partial r} \right) - \frac{1}{v_s^2} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial t^2} = m T_i(r, t), \quad (1.24)$$

где $m = K\beta_V/(\lambda + 2\mu)$ – коэффициент термоупругой связи. Решение этого уравнения описывает чисто продольные волны сжатия-растяжения. Важно отметить, что в силу симметрии источника (тепловой пик), в данной постановке не генерируются поперечные (сдвиговые) волны, так как вихревая компонента поля перемещений тождественно равна нулю ($\nabla \times \mathbf{u} = 0$) [109].

Полная математическая формулировка задачи требует задания начальных и граничных условий для механической подсистемы. В начальный момент времени $t = 0$ среда считается невозмущенной, что соответствует нулевым начальным смещениям и скоростям [71, 72, 109]:

$$u_r(r, 0) = 0, \quad \left. \frac{\partial u_r}{\partial t} \right|_{t=0} = 0. \quad (1.25)$$

На оси симметрии ($r = 0$) перемещение должно быть равно нулю из геометрических соображений: $u_r(0, t) = 0$. На внешней границе расчетной области $r = R_{max}$ необходимо поставить условие, имитирующее уход волны в бесконечность, чтобы избежать нефизичных отражений. В численных моделях для этого используются неотражающие граничные условия (например, условия излучения Зоммерфельда) или просто выбирается достаточно большая область, чтобы за время счета отраженная волна не успела вернуться в зону интереса [3, 50, 72].

Важным теоретическим вопросом является связь тепловой и механической задач. В общем случае уравнение теплопроводности также содержит слагаемое, зависящее от скорости деформации (эффект термоупругого затухания). Однако, как показывают оценки для металлических мишеней, обратное влияние механической деформации на ТП пренебрежимо мало по сравнению с мощностью источника нагрева от иона. Это позволяет использовать так называемую «несвязанную» или последовательную схему решения: сначала решается тепловая задача (система (1.14) из § 1.2) для нахождения поля $T_i(r, t)$, а затем это поле используется как известный источник в уравнении

движения (1.23). Такой подход существенно упрощает вычислительный алгоритм, не снижая точности результатов [56, 71].

Анализ волнового уравнения (1.24) позволяет выявить фундаментальные отличия в динамике распространения возмущений от цилиндрического источника по сравнению с плоским случаем. В то время как плоская волна в идеальной упругой среде распространяется без изменения формы, цилиндрическая волна, генерируемая треком иона, испытывает геометрическую дисперсию. Согласно фундаментальным решениям уравнений математической физики, даже при мгновенном прекращении действия источника, задний фронт цилиндрической волны не обрывается резко, а имеет протяженный «хвост» (последствие), обусловленный двумерной природой перераспределения энергии [2, 55]. Это означает, что локальное МН в точке наблюдения не возвращается к нулю мгновенно после прохождения фронта, а асимптотически затухает, что необходимо учитывать при анализе сигналов с акустических датчиков [64, 65].

Важнейшей характеристикой для экспериментальной регистрации треков является закон затухания амплитуды волны с расстоянием. По мере удаления от оси трека ($r \rightarrow \infty$) энергия упругого импульса распределяется по поверхности цилиндра всё большего радиуса. Из закона сохранения энергии следует, что плотность потока энергии должна убывать обратно пропорционально расстоянию r . Следовательно, амплитуда вектора смещения u_r и акустического давления P в цилиндрической расходящейся волне убывает по закону $r^{-1/2}$ [55, 71, 73]. Это относительно медленное затухание (по сравнению со сферическим случаем r^{-1}) создает благоприятные условия для детектирования сигналов от одиночных ионов на значительных макроскопических расстояниях от трека [61, 63, 74].

Форма генерируемого АИ несет в себе информацию о пространственно-временной структуре источника нагрева. Поскольку в термоупругом уравнении (1.23) вынуждающая сила пропорциональна градиенту температуры ∇T , а профиль температуры имеет гауссовую форму, то профиль волны

напряжений представляет собой биполярный сигнал: фаза сжатия (положительное давление), обусловленная передним фронтом теплового расширения, сменяется фазой разрежения (отрицательное давление). Длительность этого биполярного импульса определяется временем звуковой релаксации нагретой области $\tau_{mech} \approx 2r_0/v_s$ [73, 74]. Для нанометровых треков спектр такого сигнала лежит в гиперзвуковом диапазоне (ГГц–ТГц), однако вследствие затухания высоких частот в реальных металлах до датчика доходит уширенный низкочастотный сигнал [68].

В реальном эксперименте ион облучает образец конечных размеров, и волны многократно переотражаются от поверхностей, формируя сложную интерференционную картину (стоячие волны или моды колебаний образца) [52]. Однако на начальном этапе (первые наносекунды), рассматриваемом в теоретической части работы, нас интересует именно первичная ударная волна, уходящая от трека. Для ее корректного выделения в численных алгоритмах на границе R_{max} применяются условия неотражения, позволяющие волне беспрепятственно покидать расчетную область, имитируя бесконечную среду [40, 56].

Классическая модель идеальной упругой среды, описываемая волновым уравнением (1.23), предсказывает распространение возмущений без потерь энергии. В таком приближении ударная волна, сформированная резким тепловым расширением трека, должна сохранять бесконечно крутой передний фронт (разрыв) на любых расстояниях от источника [55]. Однако в реальных поликристаллических металлах всегда присутствуют механизмы необратимой диссипации механической энергии, приводящие к затуханию волн и трансформации их профиля. Для корректного моделирования акустического отклика на нанометровые воздействия, спектр которых простирается в гигагерцовую область, пренебрежение диссипативными эффектами недопустимо, так как затухание звука в металлах растет пропорционально квадрату частоты [1, 2, 65].

Для полного понимания физики волновых процессов, инициируемых прохождением БТИ, необходимо рассмотреть спектральный состав генерируемого акустического поля. Временная форма импульса давления $P(t)$, возникающего вблизи трека, неразрывно связана с его частотным спектром $S(\omega)$ через преобразование Фурье [53, 70]. Поскольку источником возмущения является тепловое расширение области с характерным радиусом $r_0 \sim 1-5$ нм, происходящее за характерное время $\tau_{\text{mech}} \sim 1$ пс, основной энергетический вклад в спектр сигнала вносят гиперзвуковые частоты. Оценка граничной частоты спектра f_{max} может быть выполнена исходя из соотношения неопределенностей или простого геометрического критерия:

$$f_{\text{max}} \approx \frac{v_s}{2r_0}, \quad (1.26)$$

где v_s – скорость звука. Для типичных металлов ($v_s \approx 3000-5000$ м/с) это дает значения частот порядка 0.5-1.0 ТГц (10^{12} Гц). Таким образом, первичный акустический пакет представляет собой когерентный фононный импульс терагерцового диапазона [83].

Важным аспектом теоретического анализа является вопрос о нелинейности процесса и возможности формирования истинных ударных волн с разрывом сплошности фронта. В линейной акустике (закон Гука) скорость распространения возмущения постоянна и равна скорости звука v_s . Однако при давлениях в несколько гигапаскалей, возникающих в ядре трека (см. § 1.3.1), модуль упругости начинает зависеть от деформации, и скорость распространения сжатия с возрастает с давлением:

$$v(P) \approx v_s \left(1 + \varepsilon \frac{P}{K} \right), \quad (1.27)$$

где ε – параметр акустической нелинейности среды (для металлов $\varepsilon \sim 4-10$). Это приводит к тому, что вершины профиля волны «догоняют» его подножие, увеличивая крутизну переднего фронта. Условием образования ударного фронта является преобладание нелинейного укрупнения над диссипативным размытием (вязкостью). Для нанометровых источников в металлах число Рейнольдса для акустического потока часто оказывается недостаточно

большим для формирования классического разрыва, поэтому корректнее говорить о распространении «сильных акустических возмущений» или «ударных импульсов», нежели сформировавшихся ударных волн в гидродинамическом смысле [56, 71].

Тем не менее, в непосредственной близости от трека (ближняя зона, $r < 100$ нм) амплитуда напряжений может превышать динамический предел упругости материала (предел Гюгонио). В этой области механизм распространения волны перестает быть чисто упругим и переходит в упругопластический режим [12, 58, 73]. Энергия волны расходуется на генерацию и движение дислокаций, что приводит к формированию вокруг трека зоны пластической деформации, структурно отличающейся от исходного кристалла.

Таким образом, теоретический анализ Главы I позволяет выстроить полную причинно-следственную цепь физических процессов: ионизационные потери формируют наноцилиндр высоковозбужденной плазмы, чья энергия через электрон-фононное взаимодействие передается решетке, вызывая гигапаскальный скачок давления. Возникший градиент генерирует термоупругую волну сжатия, которая затухает при распространении с потерей высоких частот, но сохраняет в своей огибающей параметры исходного энерговыделения. Между тем, как показал приведенный нам анализ существующих в литературе источников, целый ряд задач оказалось не исследованным и этому вопросу будет посвящена следующие разделы работы.

ГЛАВА II. ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИЕ АСПЕКТЫ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ИМПУЛЬСНОГО ПУЧКА ИОНОВ С МЕТАЛЛАМИ

Введение. Исследованию различных аспектов взаимодействия пучков заряженных частиц с металлическими образцами посвящено значительное количество как теоретических, так и экспериментальных работ (см., например, [1–49] и приведённую в них библиографию). Одним из ключевых направлений в данной области является изучение закономерностей формирования ТП в металлах при их облучении потоками заряженных частиц различных типов и энергий.

Более шестидесяти лет назад в работах [1–3] была предложена двухтемпературная модель, известная как МТП, описывающая процессы энергообмена между электронной и ионной (решёточной) подсистемами металла при воздействии высокоэнергетических частиц. В дальнейшем данная модель получила развитие и стала широко известна как МТП [22, 31]. В рамках этого подхода теплофизические процессы описываются системой двух связанных нелинейных уравнений теплопроводности для электронной T_e и решёточной T_i температур соответственно.

Существенный вклад в развитие МТП и её приложений к задаче трекообразования в металлах и диэлектриках внесён в работах [37–40, 44–49]. Численные и аналитические исследования двухтемпературной динамики, включая модификации модели для различных режимов энерговыделения, подробно представлены в [110–118]. Обобщённые варианты модели, учитывающие пространственную трёхмерность и неравновесные эффекты переноса энергии, рассмотрены в [9, 17, 22, 31, 37–40, 45, 47].

Несмотря на значительный объём выполненных исследований, анализ существующих литературных источников показывает, что ряд задач, связанных с формированием ТП при воздействии пучков БТИ, остаётся недостаточно изученным. В частности, требуют дальнейшего рассмотрения вопросы пространственно-временной эволюции температурных распределений с учё-

том конкретных параметров пучка и материала мишени. Настоящая глава диссертации посвящена решению именно этих задач.

Вследствие чрезвычайно малого времени передачи энергии электронной подсистеме (порядка 1–5 фс) процессы нагрева протекают в существенно неравновесном режиме [29,45, 99,100]. Поэтому модельные расчёты выполняются в рамках сценария перегрева, при котором рост температуры электронной подсистемы не ограничивается достижением температур фазовых переходов. Такой подход широко применяется при анализе ультракоротких импульсных воздействий и быстрого ионного облучения [37-45, 49].

2.1. Формирование нестационарного радиального распределения температурного поля металлов при воздействии импульсного ионного пучка со ступенчатым временным профилем

Воздействие БТИ на металлические мишени инициирует сложный каскад сверхбыстрых термодинамических процессов, фундаментальной основой которых является практически мгновенная передача энергии электронной подсистеме материала [45]. При аналитическом моделировании возникающих температурных полей, в частности в рамках МТП, важным аспектом является корректное математическое описание временного профиля источника энергии. Целью настоящего раздела является теоретическое исследование особенностей формирования нестационарного поля температуры на поверхности металлической пластины при её облучении импульсным пучком БТИ со ступенчатым временным профилем с длительностью входного воздействия от 1 до 5 фемтосекунд [49]. Использование прямоугольного импульса на данном масштабе не только обеспечивает значительное математическое упрощение при поиске точных аналитических решений, но и строго соответствует физической хронологии явления, обоснованно разделяя ультракороткую стадию первичного энерговклада и последующий этап электрон-фононного обмена, ведущий к макроскопическому разогреву кристаллической решетки.

В рамках модели предполагается, что металлический образец подвергается воздействию потока ионов, при котором нагрев материала остается в пределах, не вызывающих фазовых переходов. Тогда можно ограничиться постоянством всех теплофизических параметров и воспользоваться МТП, согласно которой имеет место следующая система линейных дифференциальных уравнений теплопроводности для поверхности облучаемого металла [1-3, 22, 31, 45]:

$$C_e \frac{\partial T_e}{\partial t} = \kappa_e \left(\frac{1}{r} \frac{\partial T_e}{\partial r} + \frac{\partial^2 T_e}{\partial r^2} \right) - g(T_e - T_i) + A_e(r, t) \quad (2.1)$$

$$C_i \frac{\partial T_i}{\partial t} = \kappa_i \left(\frac{1}{r} \frac{\partial T_i}{\partial r} + \frac{\partial^2 T_i}{\partial r^2} \right) + g(T_e - T_i), \quad (2.2)$$

где C_e , C_i , κ_e и κ_i – теплоемкости и теплопроводности электронного газа и решетки, соответственно, g – коэффициент, характеризующий передачу энергии от электронного газа решетке, а $A_e(r, t) = bS_e f(t)D(r)$, S_e – профиль ионизационных потерь иона, $f(t) = \theta(t) - \theta(t - t_0)$ – ступенчатая функция Хэвисайда, а $D(r) = \exp(-r/r_0)$, где t_0 – длительность воздействия источника (импульса), r_0 – пространственная ширина высоковозбужденных области ($r_0 \leq 2.5$ нм, согласно данным в [93]) и $r_0 \approx 1$ нм [25]).

Для решения системы уравнений (2.1)-(2.2) мы воспользуемся интегральными преобразованиями Лапласа по t и Ханкеля по r [119]

$$\hat{T}(s, p) = \int_0^\infty \left[\int_0^\infty T(r, t) J_0(rs) r dr \right] e^{-pt} dt, \quad (2.3)$$

где J_0 – функция Бесселя.

Учитывая начальное условие $T'_{e,i}(r, 0) = 0$ из системы (2.1)-(2.2) получим следующую систему алгебраических уравнений:

$$C_e p \hat{T}'_e(s, p) = -\kappa_e s^2 \hat{T}'_e(s, p) - g[\hat{T}'_e(s, p) - \hat{T}'_i(s, p)] + bS_e \hat{f}(p) \tilde{D}(s), \quad (2.4)$$

$$C_i p \hat{T}'_i(s, p) = -\kappa_i s^2 \hat{T}'_i(s, p) + g[\hat{T}'_e(s, p) - \hat{T}'_i(s, p)]. \quad (2.5)$$

Здесь $\hat{f}(p) = \int_0^\infty \theta(t) e^{-pt} dt = \frac{1 - e^{-t_0 p}}{p}$ и $\tilde{D}(s) = \int_0^\infty e^{-r/r_0} J_0(rs) r dr = r_0^2 (1 + r_0^2 s^2)^{-3/2}$.

(Подробный вывод интегралов представлены в Приложениях I и II).

Из уравнения (2.5) получим:

$$\hat{T}'_l(s, p) = \frac{g}{C_i p + \kappa_i s^2 + g} \hat{T}'_e(s, p). \quad (2.6)$$

Подставляя полученное выражение для $\hat{T}'_l$ в уравнении (2.4), получим

$$\hat{T}'_e(s, p) = \frac{b S_e \hat{f}(p) \tilde{D}(s) (C_i p + \kappa_i s^2 + g)}{(C_e p + \kappa_e s^2 + g) (C_i p + \kappa_i s^2 + g) - g^2}.$$

Далее, подставляем полученное выражение для $\hat{T}'_e$ в (2.6):

$$\hat{T}'_l(s, p) = \frac{g}{C_i p + \kappa_i s^2 + g} \cdot \frac{b S_e \hat{f}(p) \tilde{D}(s) (C_i p + \kappa_i s^2 + g)}{(C_e p + \kappa_e s^2 + g) (C_i p + \kappa_i s^2 + g) - g^2}.$$

В результате сокращения общих множителей приходим к соотношениям:

$$\hat{T}'_l(s, p) = \frac{g \cdot b \cdot S_e \cdot \tilde{D}(s)}{C_e C_i} \cdot (1 - e^{-t_0 p}) \cdot \left[\frac{1}{p(p - p_1)(p - p_2)} \right], \quad (2.7)$$

$$\hat{T}'_e(s, p) = \frac{b S_e \tilde{D}(s)}{C_e C_i} \cdot (1 - e^{-t_0 p}) \cdot \left[\frac{C_i p + \kappa_i s^2 + g}{p(p - p_1)(p - p_2)} \right], \quad (2.8)$$

где

$$p_{1,2}(s) = -\frac{C_e(\kappa_i s^2 + g) - C_i(\kappa_e s^2 + g)}{2C_e C_i} \pm \frac{\sqrt{[C_e(\kappa_i s^2 + g) + C_i(\kappa_e s^2 + g)]^2 - 4C_e C_i[(\kappa_e s^2 + g)(\kappa_i s^2 + g) - g^2]}}{2C_e C_i}.$$

Разложим выражение в квадратных скобках на элементарные дроби:

$$\frac{C_i p + \kappa_i s^2 + g}{p(p - p_1)(p - p_2)} = \frac{\alpha_0}{p} + \frac{\alpha_1}{p - p_1} + \frac{\alpha_2}{p - p_2}$$

$$\text{где } \alpha_0 = \frac{\kappa_i s^2 + g}{p_1 p_2}, \alpha_1 = \frac{C_i p_1 + \kappa_i s^2 + g}{p_1(p_1 - p_2)}, \alpha_2 = \frac{C_i p_2 + \kappa_i s^2 + g}{p_2(p_2 - p_1)}.$$

Выполняя обратные преобразования Ханкеля по r и Лапласа по t [119] от этих функций согласно выражение

$$T(r, t) = \int_0^\infty J_0(rs) \left\{ \frac{1}{2\pi i} \int_{\sigma - i\infty}^{\sigma + i\infty} \hat{T}(s, p) e^{pt} dp \right\} s ds \quad (2.9)$$

будем иметь:

$$T'_i(r, t) = \frac{b S_e g r_0^2}{C_e C_i} \int_0^\infty \frac{J_0(rs)}{(1 + r_0^2 s^2)^{3/2}} [\Phi_i(t) u(t) - \Phi_i(t - t_0) u(t - t_0)] s ds, \quad (2.10)$$

$$T'_e(r, t) = \frac{b S_e r_0^2}{C_e C_i} \int_0^\infty \frac{J_0(rs)}{(1 + r_0^2 s^2)^{3/2}} [\Phi_e(t) u(t) - \Phi_e(t - t_0) u(t - t_0)] s ds, \quad (2.11)$$

где

$$\Phi_i(t) = \frac{1}{p_1 p_2} + \frac{1}{p_1(p_1 - p_2)} e^{p_1 t} + \frac{1}{p_2(p_2 - p_1)} e^{p_2 t},$$

$$\Phi_e(t) = \frac{\kappa_i s^2 + g}{p_1 p_2} + \frac{C_i p_1 + \kappa_i s^2 + g}{p_1(p_1 - p_2)} e^{p_1 t} + \frac{C_i p_2 + \kappa_i s^2 + g}{p_2(p_2 - p_1)} e^{p_2 t}.$$

Для выполнения численных расчетов величин T_e и T_i необходимо знание величины нормировочной константы b . Используя условие нормировки (1.11), получим следующее выражение: $b = \frac{1}{2\pi t_0 r_0^2}$ (Подробный вывод интеграла представлен в Приложении III.). Подставляя эту величину в выражения (2.10) и (2.11), можно выполнить её численное интегрирование для конкретного металла и получить пространственно-временное поведение возмущения электронных и ионных температур. Нами выполнен такой расчет для никеля (Ni), золота (Au) и медь (Cu) для которого при $T=300\text{K}$ теплофизические величины и другие параметры, входящие в выражения (2.10) и (2.11), показано в таблице 2.1. [22, 120]. Следуя [22, 37] для параметров пучка примем следующие значения: $t_0 = 1$ фс, $r_0 = 2$ нм. Результаты расчета иллюстрированы на рисунках 2.1-2.4.

Таблица 2.1. Теплофизические параметры металлов и параметры ионизационных потерь, применяемые для численных расчетов.

Материал	κ_e [Вт/(м·К)]	κ_i [Вт/(м·К)]	$g [\times 10^{16}$ Вт/(м ³ ·К)]	$C_i [\times 10^6$ Дж/(м ³ ·К)]	$C_e [\times 10^4$ Дж/(м ³ ·К)]	$S_e [\times 10^{-5}$ Дж/м]
Золото	315 [120]	2 [120]	2.3 [22, 49]	2.50 [120]	2.1 [120]	1.59 [22]
Медь	396 [120]	5 [120]	12,7 [22, 49]	3.41 [120]	2.83 [120]	1.17 [22]
Никель	91 [120]	16 [120]	107 [22, 49]	3.91 [120]	31 [120]	1.23 [22]

На рис. 2.1 показана анализ пространственно-временной динамики температур в никеле при длительности импульса $t_0 = 1$ фс выявляет четкую радиальную зависимость термического отклика, обусловленную экспоненциальным профилем энерговыведения $D(r) = \exp(-r/r_0)$. В центре трека ($r = 0$) наблюдается максимальный нагрев электронной подсистемы до $T_e \approx 3.5 \times 10^6$ К, в то время как на периферии ($r = 2r_0$) пиковое значение снижается до $\approx 1.8 \times 10^6$ К. Характерно, что момент достижения локального термодинами-

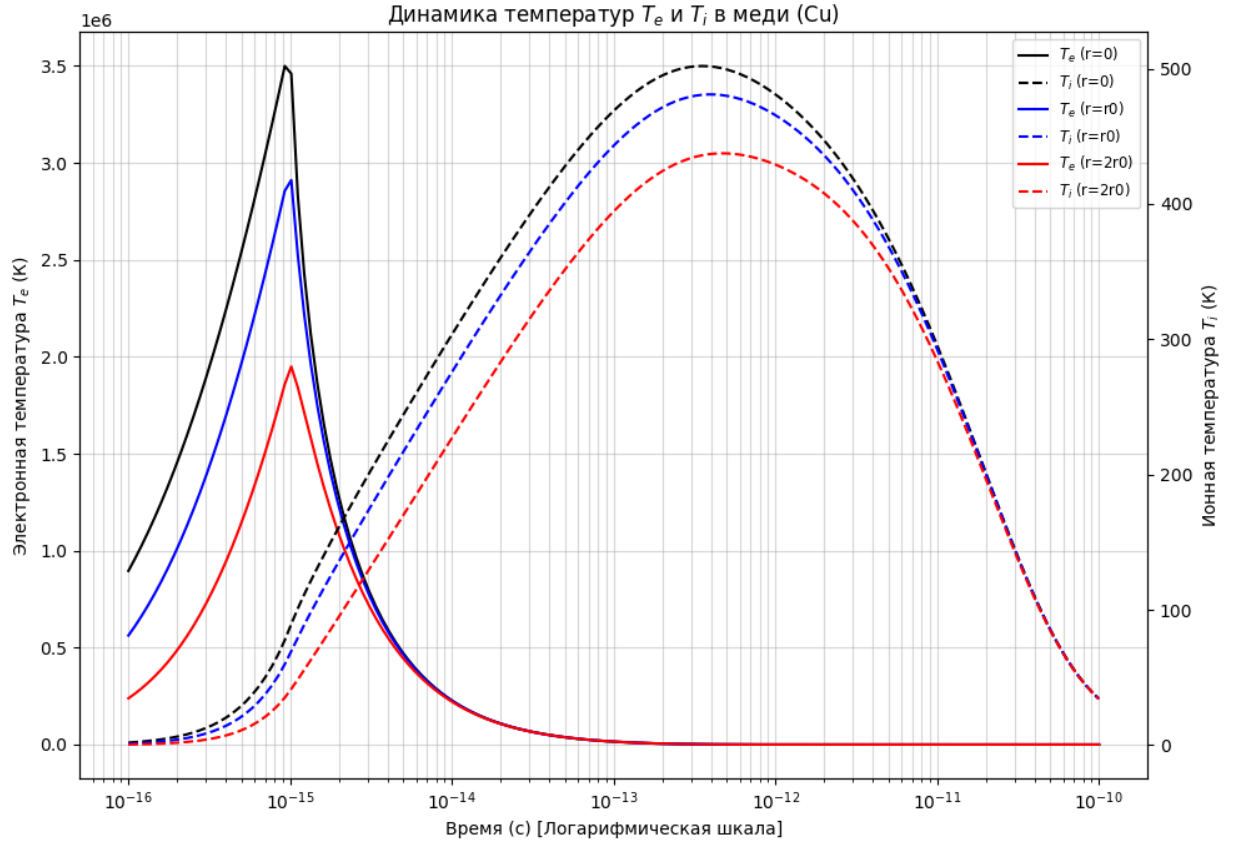


Рис. 2.1. Временная эволюция температур электронной подсистемы T_e (сплошные линии) и кристаллической решетки T_i (пунктирные линии) медь (Cu) в различных радиальных сечениях ($r = 0, r = r_0, r = 2r_0$) при длительности импульса $t_0 = 1$ фс.

ческого равновесия во всех точках зафиксирован в момент $\approx 0.5 \times 10^{-12}$ с, что соответствует времени релаксации $\tau_{ep} \approx 0,22$ пс (соотношение C_e/g) момента прекращения действия импульса. Выход ионной температуры на плато (порядка 4000–6000 К в центре) именно никель демонстрирует наиболее высокую ионную температуру $\Delta T_i \approx 5600$ К к моменту $t \approx C_e/g \approx 0,3$, так как накопленная в центре энергия последующим синхронным остыванием всех подсистем подтверждает, что после установления электрон-фононного равновесия доминирующим механизмом диссипации энергии становится радиальная диффузия тепла из области начального возбуждения.

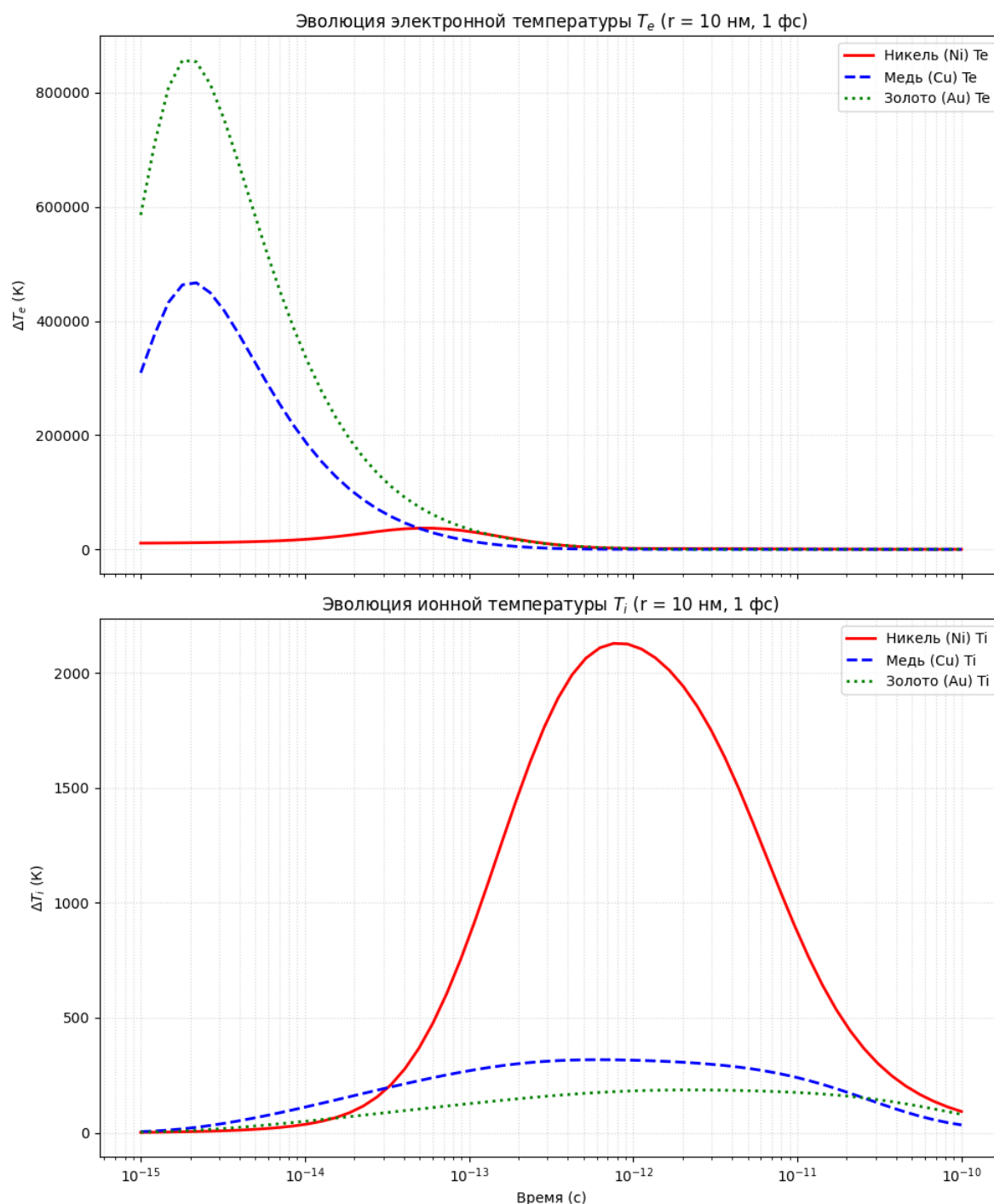


Рис. 2.2. Временная эволюция температурного отклика электронной подсистемы ΔT_e (верхний график) и кристаллической решетки ΔT_i (нижний график) для металлов (Ni, Cu, Au) на расстоянии 10 нм ($r = 5r_0$) от оси трека при длительности импульса $t_0 = 1$ фс.

На рис. 2.2 показан сравнительный анализ временной динамики температур на значительном удалении от оси трека ($r = 10$ нм) выявляет фунда-

ментальные различия в механизмах переноса энергии между переходными (Ni) и благородными (Cu, Au) металлами. Высокая электронная теплопроводность золота и меди обеспечивает эффективную диффузию «горячих» электронов из центральной зоны, что проявляется в быстром росте электронной температуры ΔT_e на периферии уже в первые фемтосекунды после импульса. В никеле же, напротив, сочетание относительно низкой теплопроводности $\kappa_e = 91 \text{ Вт}/(\text{м} \cdot \text{К})$ и аномально высокого коэффициента электрон-фононной связи g приводит к тому, что энергия практически не успевает распространиться электронным газом на расстояние 10 нм, а быстро передается локальной решетке. Это объясняет парадоксальный на первый взгляд результат: при минимальном электронном перегреве на данном радиусе достигает периферии преимущественно за счет последующих диффузионных процессов в ионной подсистеме и эффективного стока из электронного газа.

На рис. 2.3 показан сравнительный анализ динамики температур в никеле при различных длительностях ионного облучения выявляет выраженную зависимость пикового нагрева электронной подсистемы от темпа ввода энергии. Сокращение импульса с 1 фс до 5 фс приводит к почти двукратному росту максимума T_e (до $3.5 \times 10^6 \text{ К}$), так как энергия аккумулируется в электронной подсистеме быстрее, чем происходит её сток в кристаллическую решетку. Несмотря на существенное различие в амплитудах температурных пиков электронов, обе системы выходят на идентичное плато ионной температуры $T_i \approx 500 \text{ К}$ в моменте 0.5 пс, что коррелирует с теоретическим временем релаксации $\tau_{ep} = C_e/g \approx 0,22 \text{ пс}$. Последующее затухание температурных профилей после 0.5 пс свидетельствует о переходе системы к стадии пространственного охлаждения за счет радиальной диффузии тепла.

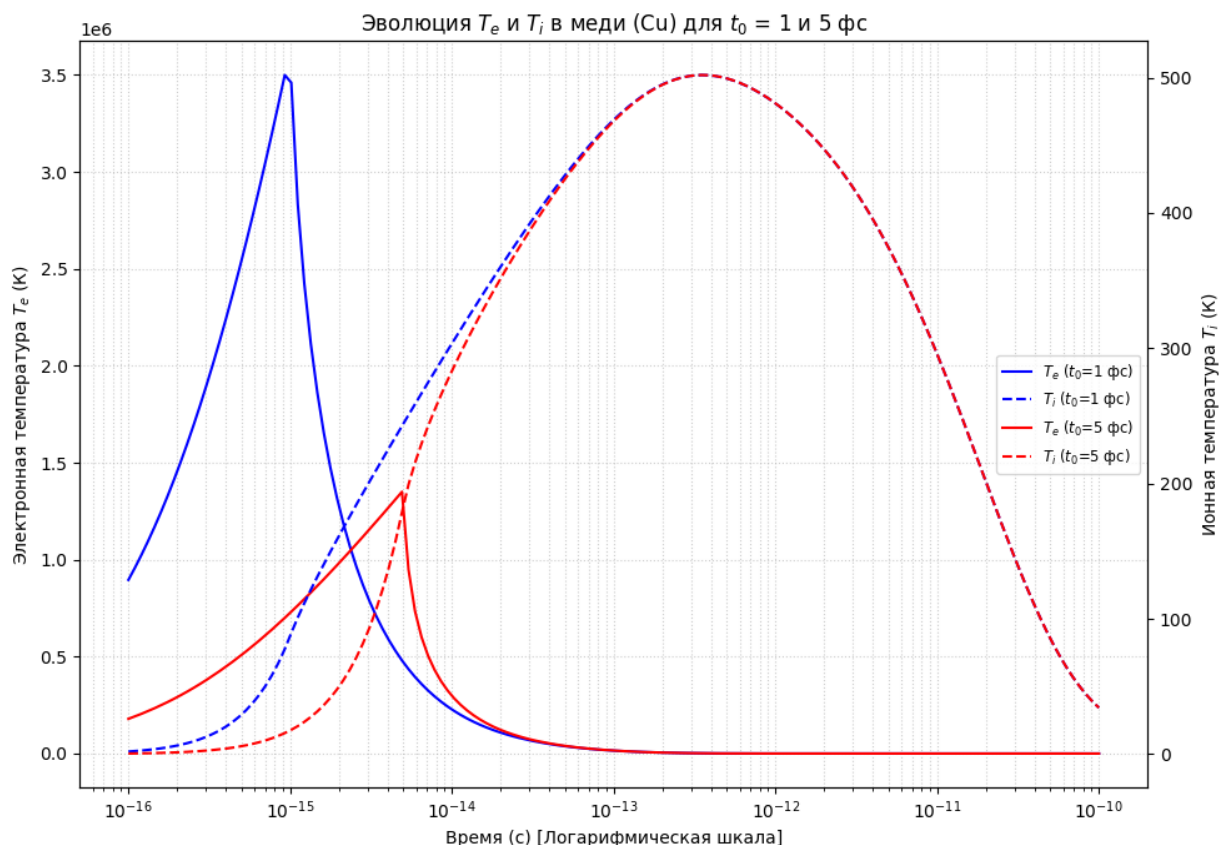


Рис. 2.3. Временная динамика температуры электронного газа (сплошные линии) и кристаллической решетки (пунктирные линии) меди (Cu) в центре трека ($r=0$) при длительности облучения 1 фс и 5 фс.

На рис. 2.4 показаны радиальные профили пиковых температур подчеркивают высокую степень пространственной локализации энергии в нанометровой окрестности оси трека ($r_0 = 2$ нм), при этом времени интервал достижения максимума ионной температуры ($t = \tau_{ep} \approx 0,22$ пс) находится в строгом соответствии с кинетикой электрон-решеточной релаксации и электронная подсистема достигает своего максимума T_e непосредственно в момент окончания импульса (5 фс). Это подтверждает, что в условиях сверхбыстрого ионного воздействия момент максимального разогрева решетки детерминирован скоростью передачи энергии от «горячих» электронов, а радиальный профиль T_i в этот момент еще сохраняет форму функции распределения начального энерговклада $D(r)$ вследствие малого времени для развития процессов тепловой диффузии.

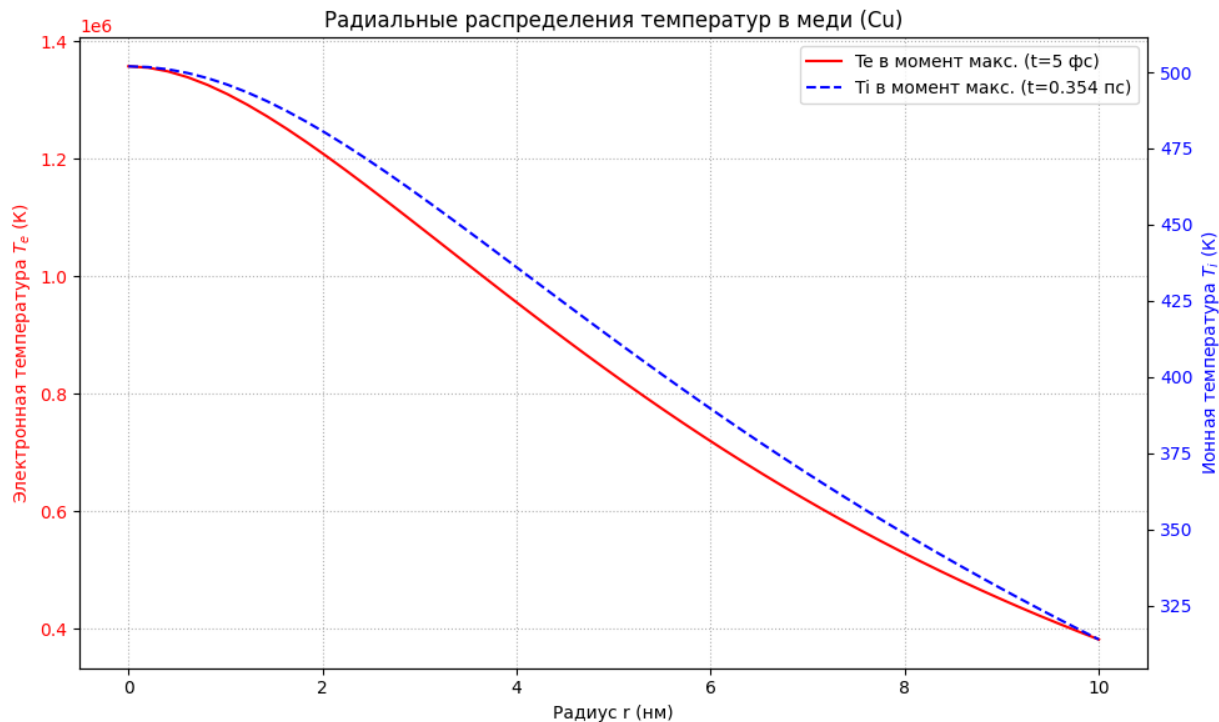


Рис. 2.4. Радиальные профили температуры электронной подсистемы T_e (сплошная линия) и кристаллической решетки T_i (штриховая линия) меди (Cu) в моменты достижения ими максимальных значений ($t = t_0$ и $t = \tau_{ep}$), при длительности импульса $t_0 = 5$ фс .

2.2. Формирование температурного поля в металлических пластинках под действием пучка ионов с экспоненциальным временным и гауссовым радиальным затуханием

В настоящем разделе работы исследуются закономерности формирования нестационарных ТП в металлах при воздействии БТИ, что требует перехода от общетеоретических обзоров к детальному математическому моделированию с использованием уточненных функций источника. В отличие от классических подходов, рассматривающих мгновенное выделение энергии, данное исследование фокусируется на анализе тепловой релаксации в рамках МТП при экспоненциальном временном затухании импульса и гауссовом радиальном распределении поглощенной дозы [103, 104]. Такой подход позволяет более точно описать кинетику передачи энергии от сверхгорячего элек-

тронного газа к кристаллической решетке в материалах с высокой теплопроводностью, таких как медь и золото, где конкуренция между диффузией носителей и электрон-фононным обменом критически влияет на пиковые значения температур. Полученные аналитические решения служат необходимым фундаментом для количественной оценки градиентов тепловых полей, которые являются первопричиной возникновения ТУН и последующей генерации АИ.

При прохождении БТИ его кинетическая энергия передается электронной подсистеме, что количественно описывается электронной тормозной способностью S_e [77-89]. Поскольку ионизационные потери в рассматриваемом диапазоне энергий значительно превышают ядерные, нагрев решетки происходит исключительно за счет электрон-фононного взаимодействия с коэффициентом связи g [31, 45]. При расчетах по МТП систему уравнений целесообразно упростить: так как теплопроводность электронов существенно выше теплопроводности кристаллической решетки, диффузионным переносом тепла в ионной подсистеме на пикосекундных масштабах пренебрегают. В результате слагаемое с коэффициентом ионной теплопроводности k_i полностью исключается из модели [100]. Математически эволюция температур электронной T_e и ионной T_i подсистем в цилиндрических координатах описывается связанной системой уравнений теплопроводности:

$$C_e \frac{\partial T_e}{\partial t} = \kappa_e \left(\frac{1}{r} \frac{\partial T_e}{\partial r} + \frac{\partial^2 T_e}{\partial r^2} + \frac{\partial^2 T_e}{\partial z^2} \right) - g(T_e - T_i) + A_e(r, t), \quad (2.12)$$

$$C_i \frac{\partial T_i}{\partial t} = g(T_e - T_i), \quad (2.13)$$

где $A_e(r, t)$ – объемная плотность мощности, вносимой потоком ионов в электронную подсистему. Следуя [103, 104], представим $A_e(r, t)$ в виде наиболее часто используемого выражения (1.12): $A_e(r, t) = b S_e f(t) D(r)$, где $f(t) = e^{-\alpha t}$, $\alpha = 1/t_0$, $D(r) = e^{-r^2/r_0^2}$, r_0 – пространственная полуширина распределения Гаусса. Величина b , определяемая из условия нормировки (1.11), имеет следующее упрощенный вид: $b = \alpha/(\pi r_0^2)$, (Подробный вывод интеграла приведен в Приложении IV.).

Необходимые для совместного решения системы уравнения (2.12) и (2.13) начальное и граничные условия примем в следующем виде [37-40, 119]:

$$T'_{e,i}(r, z, 0) = 0, \quad \left. \frac{\partial T'_{e,i}(r, z, t)}{\partial r} \right|_{r=0} = 0, \quad \kappa_{e,i} \left. \frac{\partial T'_{e,i}(r, z, t)}{\partial z} \right|_{z=0,L} = 0. \quad (2.14)$$

Учитывая начальное условия $T'_{e,i}(r, z, 0) = 0$ выполним преобразования Лапласа по t и Ханкеля по r [119] из системы (2.12)-(2.13) получим следующую систему алгебраических уравнений:

$$C_e p \hat{T}'_e = -\kappa_e s^2 \hat{T}'_e + \kappa_e \frac{\partial^2 \hat{T}'_e}{\partial z^2} - g(\hat{T}'_e - \hat{T}'_i) + b \hat{f}(p) \tilde{D}(s), \quad (2.15)$$

$$C_i p \hat{T}'_i = g(\hat{T}'_e - \hat{T}'_i), \quad (2.16)$$

где $\hat{f}(p) = \int_0^\infty e^{-\alpha t} e^{-pt} dt = \frac{1}{p+\alpha}$ и $\tilde{D}(s) = \int_0^\infty e^{-r^2/r_0^2} J_0(rs) r dr = \frac{r_0^2}{2} e^{-r_0^2 s^2/4}$. (Подробные выводы интегралов приведены в Приложениях V и VI.).

Из уравнения (2.16) получим:

$$\hat{T}'_i(s, z, p) = \frac{g}{C_i(p + g/C_i)} \hat{T}'_e(s, z, p). \quad (2.17)$$

Подставляя полученное выражение для $\hat{T}'_i$ в уравнение (2.15), получим

$$\frac{\partial^2 \hat{T}'_e}{\partial z^2} - q^2 \hat{T}'_e = -\frac{b S_e \hat{f}(p) \tilde{D}(s)}{\kappa_e} \quad (2.18)$$

где

$$q^2 = \frac{C_e p^2 + p(g + \kappa_e s^2 + g C_e / C_i) + \kappa_e s^2 g / C_i}{\kappa_e (p + g / C_i)}.$$

Для аналитического решения дифференциального уравнения (2.18) мы применяем классический метод вариации произвольных постоянных [119]. Отсюда получим:

$$\hat{T}'_e(s, z, p) = c_1 e^{qz} + c_2 e^{-qz} + \frac{b S_e \hat{f}(p) \tilde{D}(s)}{\kappa_e q^2} \quad (2.19)$$

Для нахождения произвольных постоянных интегрирования c_1 и c_2 в уравнении (2.19) необходимо применить граничные условия (2.14). Отсюда получим $c_1 = c_2 = 0$. Следовательно, решение для электронной температуры в пространстве Лапласа-Ханкеля существенно упрощается:

$$\hat{T}'_e(s, p) = \frac{bS_e \hat{f}(p) \tilde{D}(s)}{\kappa_e q^2} \quad (2.20)$$

Подставляя явное выражение для параметра q^2 из (2.18) в полученное уравнение (2.20) и проводя алгебраические преобразования, мы выражаем трансформанту электронной температуры через характеристические корни системы:

$$\hat{T}'_e(s, p) = \frac{bS_e \tilde{D}(s)}{C_e} \hat{f}(p) \frac{p + g/C_i}{(p - p_1)(p - p_2)}, \quad (2.21)$$

где

$$p_{1,2} = \frac{-\left(\kappa_e s^2 + g + \frac{gC_e}{C_i}\right) \pm \sqrt{\left(\kappa_e s^2 + g + \frac{gC_e}{C_i}\right)^2 - 4C_e \left(\frac{g\kappa_e s^2}{C_i}\right)}}{2C_e} \quad (2.22)$$

Чтобы получить искомое выражение для $\hat{T}'_e(s, t)$ в (2.21) необходимо выполнить обратное преобразование Лапласа по t

$$T'_e(s, t) = L^{-1}[\hat{T}'_e(s, p)],$$

где L^{-1} – оператор обратного преобразования Лапласа. Поскольку в уравнении (2.21) присутствует функция $\hat{f}(p)$ (образ импульса источника ионной пучки), мы применяем теорему о свертке [46;47]:

$$L^{-1}[F(p) \cdot G(p)] = \int_0^t L^{-1}[F(p)]_{p \rightarrow \tau} L^{-1}[G(p)]_{p \rightarrow t-\tau} d\tau = \int_0^t F(\tau) G(t - \tau) d\tau. \quad (2.23)$$

Обратное преобразование Лапласа от $\frac{1}{p - p_k}$ это экспонента $e^{p_k t}$. Тогда для электронной подсистемы временная динамика возмущения принимает вид:

$$\tilde{T}'_e(s, t) = \frac{bS_e \tilde{D}(s)}{C_e(p_1 - p_2)} \int_0^t f(\tau) [(p_1 + g/C_i)e^{p_1(t-\tau)} - (p_2 + g/C_i)e^{p_2(t-\tau)}] d\tau. \quad (2.24)$$

Подставляя (2.21) в (2.17), получаем выражение для ионной температуры:

$$\hat{T}'_i(s, p) = \frac{bS_e g \tilde{D}(s) \hat{f}(p)}{C_e C_i (p - p_1)(p - p_2)}. \quad (2.25)$$

Аналогичная процедура обратного преобразования Лапласа для температуры кристаллической решетки дает следующее интегральное выражение:

$$\tilde{T}'_i(s, t) = \frac{bS_e g \tilde{D}(s)}{C_e C_i (p_1 - p_2)} \int_0^t f(\tau) [e^{p_1(t-\tau)} - e^{p_2(t-\tau)}] d\tau \quad (2.26)$$

На заключительном этапе теоретического вывода необходимо осуществить переход из пространства параметра Ханкеля s в реальное радиальное пространство r (приведенное в (2.9)). Выполняя обратное преобразование Ханкеля нулевого порядка от функций (2.24) и (2.26) получим общие выражения для пространственно-временных полей электронной температуры:

$$T'_e(r, t) = \frac{bS_e}{C_e} \int_0^\infty \frac{\tilde{D}(s)J_0(rs)}{(p_1 - p_2)} \times \\ \times \left(\int_0^t f(\tau) \left[\left(p_1 + \frac{g}{C_i} \right) e^{p_1(t-\tau)} - \left(p_2 + \frac{g}{C_i} \right) e^{p_2(t-\tau)} \right] d\tau \right) s ds, \quad (2.27)$$

и температуры ионной решетки:

$$T'_i(r, t) = \frac{bS_e g}{C_e C_i} \int_0^\infty \frac{\tilde{D}(s)J_0(rs)}{(p_1 - p_2)} \left(\int_0^t f(\tau) [e^{p_1(t-\tau)} - e^{p_2(t-\tau)}] d\tau \right) s ds. \quad (2.28)$$

Вычисляя интеграл по времени в выражениях (2.27) и (2.28), получим:

$$T'_e(r, t) = \frac{bS_e r_0^2}{2C_e} \int_0^\infty \frac{e^{-r_0^2 s^2/4} J_0(rs)}{p_1 - p_2} \times \\ \times \left[\left(p_1 + \frac{g}{C_i} \right) \frac{e^{p_1 t} - e^{-\alpha t}}{p_1 + \alpha} - \left(p_2 + \frac{g}{C_i} \right) \frac{e^{p_2 t} - e^{-\alpha t}}{p_2 + \alpha} \right] s ds \quad (2.29)$$

$$T'_i(s, t) = \frac{bS_e g r_0^2}{2C_e C_i} \int_0^\infty e^{-\frac{s^2 r_0^2}{4}} \frac{J_0(rs)}{p_1 - p_2} \left[\frac{e^{p_1 t} - e^{-\alpha t}}{p_1 + \alpha} - \frac{e^{p_2 t} - e^{-\alpha t}}{p_2 + \alpha} \right] s ds \quad (2.30)$$

Используя выражения (2.29) и (2.30) мы провели численный расчет ТП для образцов из никеля (Ni), золота (Au) и медь (Cu), для которых теплофизические параметры при $T=300$ K приведены в таблице 2.1. Результаты расчеты иллюстрированы на рисунках 2.5 - 2.7.

На рис. 2.5 продемонстрирована временная динамика температур электронной (T_e) и ионной (T_i) подсистем меди (Cu) на различных радиальных удалениях от оси трека быстрого тяжелого иона ($r = 0, r_0, 2r_0$). Поведение кривых наглядно иллюстрирует фундаментальную особенность двухтемпературной модели при возбуждении среды БТИ: наличие выраженной термодинамической неравновесности на начальном этапе взаимодействия. Электронная температура T_e достигает экстремальных значений практически

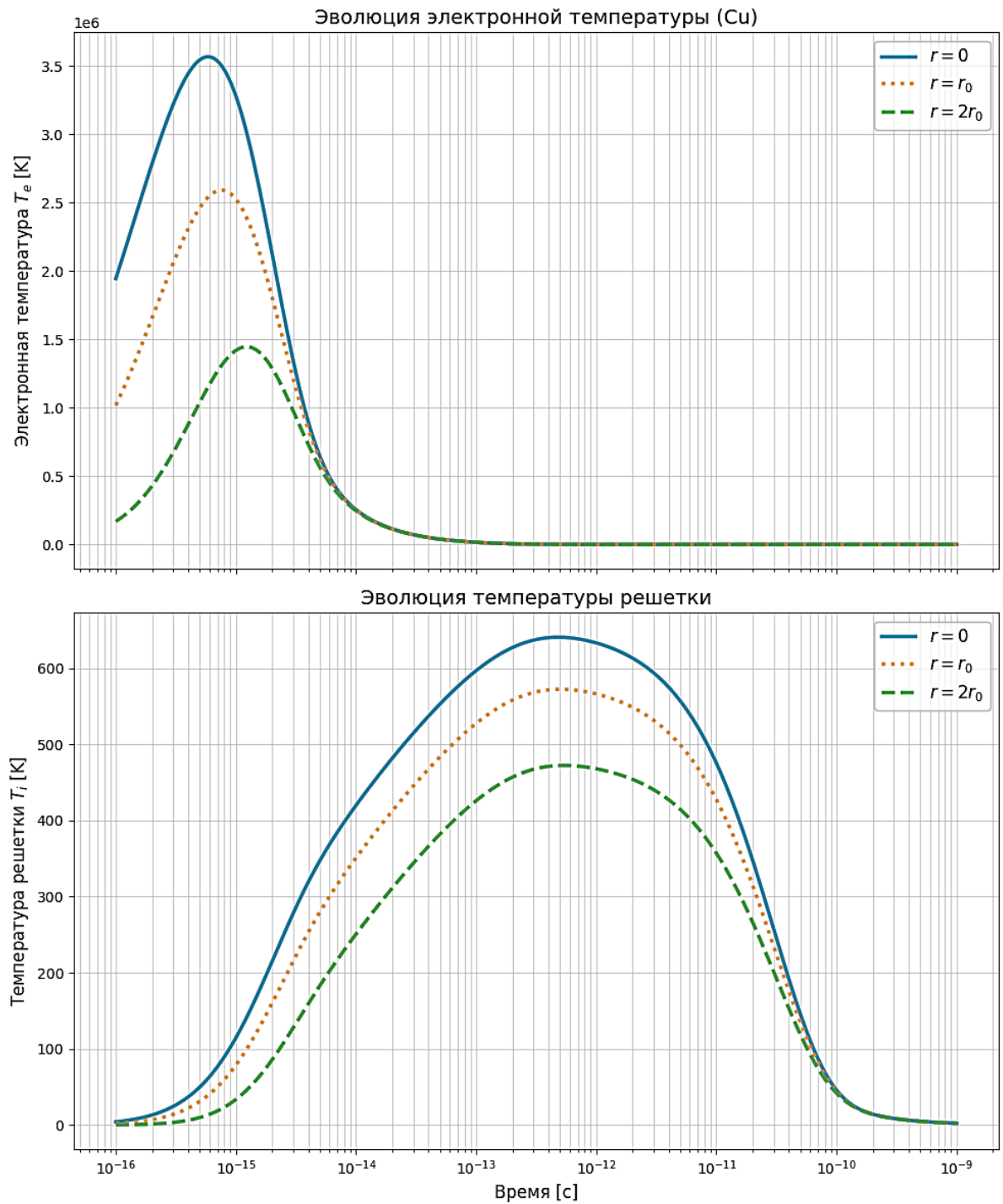


Рис. 2.5. Временная зависимость температуры электронного газа (верхний) и решетки (нижний) пластинки меди (Cu) при облучении 5 МэВ/а.е.м. ионов урана: $r = 0, r = r_0, r = 2r_0$, и $t_0 = 1$ фс.

мгновенно ($t \approx t_0 \approx 1$ фс), что соответствует характерному времени термализации δ -электронов и завершению первичной передачи энергии от налетающего иона в электронную подсистему. Стоит отметить, что столь значитель-

ный нагрев электронной подсистемы золота (Au) по сравнению с медью и никелем обусловлен сочетанием минимальной электронной теплоемкости (C_e), крайне слабого электрон-фоонного взаимодействия (g) и более высокого значения поглощенной энергии (S_e). В противоположность этому, температура решетки T_i нарастает инерционно, достигая квазистационарного максимума лишь к моменту $t \approx 0.5$ пс, что обусловлено конечным временем электрон-фоонной релаксации ($t_{ep} = C_e/g$) [22, 45, 46]. Стоит отметить, что резкий спад температуры электронов после достижения пика вызван совокупным действием двух факторов: передачей энергии в решетку и высокой электронной теплопроводностью меди, обеспечивающей эффективный вынос тепла из области трека. Более интенсивный теплоотвод и сильное электрон-фоонное взаимодействие в меди приводят к более быстрому охлаждению электронной подсистемы и более интенсивному разогреву решетки по сравнению с золотом.

Сравнительный анализ временной эволюции температур для исследуемых металлов (Ni, Cu, Au), приведенный на рис. 2.6 однозначно указывает на определяющую роль константы электрон-фоонного взаимодействия (g) в формировании теплового отклика мишени. На графиках наблюдается фундаментальное различие в динамике релаксации: для никеля, обладающего аномально высокой константой связи ($g \approx 10.7 \times 10^{17}$ Вт/м³К), эффективной релаксацией, которая быстро накачивает энергию в решетку, тогда как в благородных металлах (Au, Cu) слабая связь приводит к удержанию энергии в электронной подсистеме и ее преимущественной диссипации за счет теплопроводности, минимизируя нагрев самой мишени, что обуславливает их высокую радиационную стойкость.

На рис. 2.7 приведены радиальные распределения температур T_e и T_i , зафиксированные в ключевые моменты эволюции трека. Сплошная кривая отображает профиль электронной температуры в момент времени $t \approx t_0$,

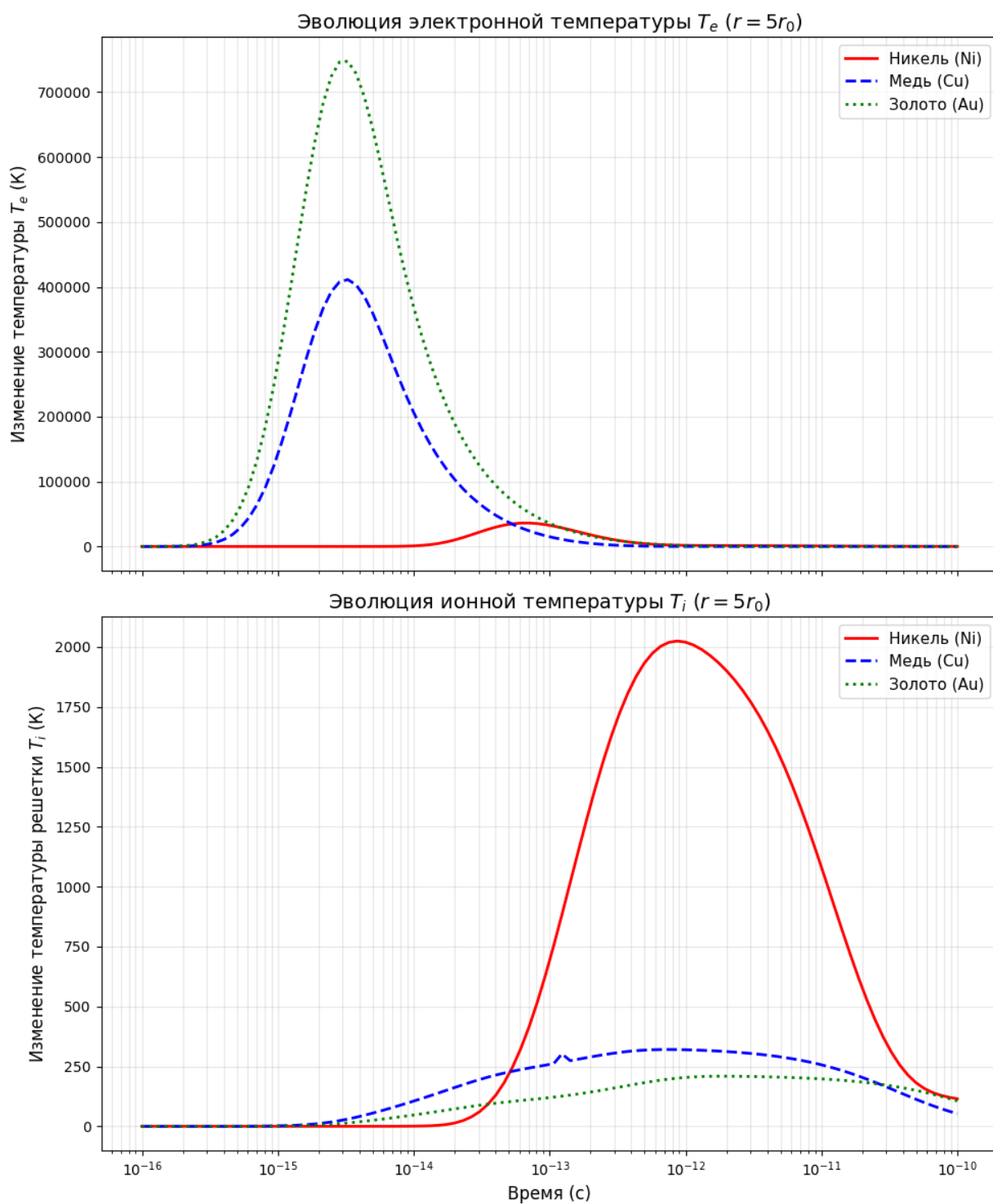


Рис. 2.6. Временная эволюция температурного отклика электронной подсистемы ΔT_e (верхний график) и кристаллической решетки ΔT_i (нижний график) для металлов (Ni, Cu, Au) на расстоянии $r = 5r_0$ от оси трека.

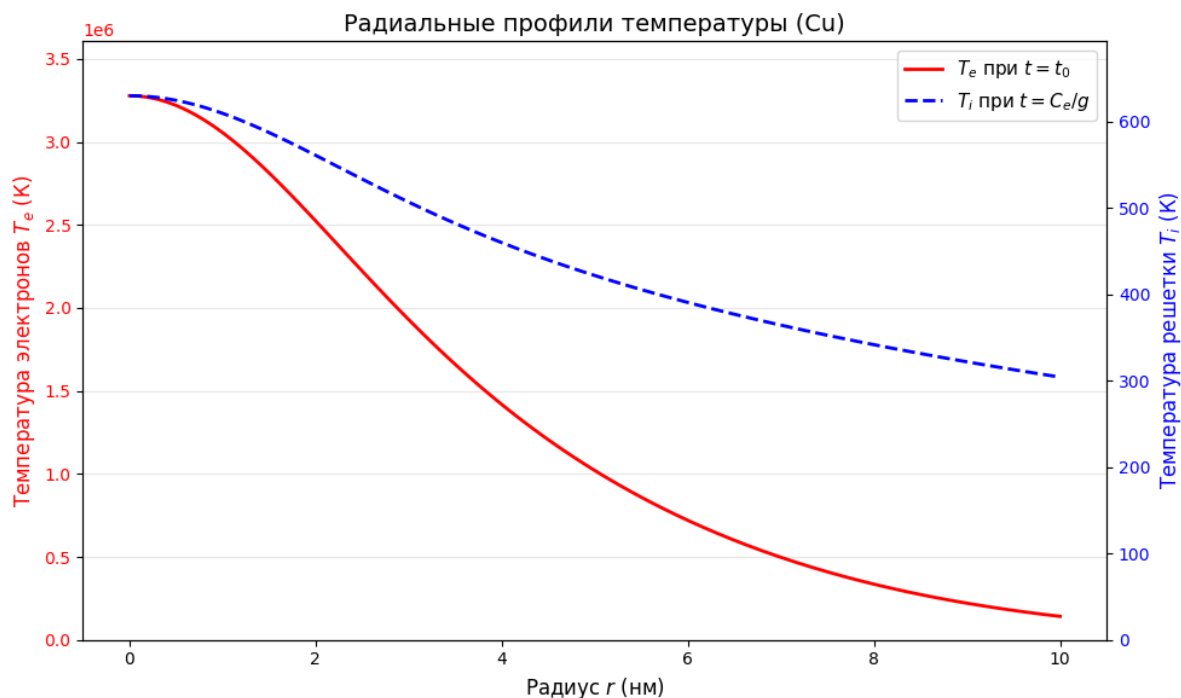


Рис. 2.7. Радиальные профили температуры электронной подсистемы T_e (сплошная линия) и кристаллической решетки T_i (штриховая линия) меди (Cu) в моменты достижения ими максимальных значений ($t = t_0$ и $t = \tau_{ep}$).

демонстрируя высокую локализацию плотности энергии в области ядра трека с пиковыми значениями порядка 3.3×10^6 K. Штриховая линия (синий цвет) соответствует профилю температуры решетки в момент $t = C_e/g$, когда перекачка энергии от горячих электронов к ионам наблюдается стремительная передача энергии в решетку, приводящая к её экстремальному разогреву ($T_i \approx 8200$ K) и неизбежному структурному повреждению. Такая интенсивная передача энергии в никеле обусловлена наиболее эффективной. Использование двух масштабов по оси координат позволяет сопоставить энергетику процессов: несмотря на сверхвысокий начальный разогрев электронного газа, конечная температура ионной подсистемы в области трека оказывается на порядки ниже. Это различие объясняется значительной разницей теплоемкостей ($C_i \gg C_e$) и диссипацией энергии в объем мишени за счет тепловой диффузии до момента установления локального равновесия. Более того, форма

радиального профиля температуры коррелирует с гауссовым пространственным распределением источника ($D(r) = e^{-r^2/r_0^2}$), демонстрируя характерный экспоненциальный спад от центра трека ($r = 0$) к периферии, обусловленный диффузионным расширением изначально локализованной тепловой области.

2.3. Формирование температурных полей в металлических пластинках под действием ионного пучка с гауссовым временным и экспоненциальным радиальным распределением

В предыдущем разделе было рассмотрено формирование ТП при экспоненциальном затухании импульса во времени и гауссовом радиальном распределении. Однако, как показывают экспериментальные данные и строгий теоретический анализ процессов трекообразования, радиальное распределение дозы, формируемое каскадами вторичных, дельта-электронов вокруг траектории БТИ, более адекватно описывается экспоненциально затухающим профилем. В то же время, временная динамика термализации электронной подсистемы, обусловленная стохастическим характером электрон-электронных и электрон-фононных столкновений, хорошо аппроксимируется гауссовой функцией. В связи с этим, для более точного количественного описания кинетики сверхбыстрого нагрева и последующей релаксации в металлических мишенях, в данном разделе исследуется пространственно-временная эволюция температур при воздействии пучка БТИ с гауссовым профилем во времени и экспоненциальным радиальным распределением [18, 22, 31, 37-40, 45, 47, 102]. Физическое значение такого подхода заключается в возможности корректного учета экстремальных градиентов плотности энергии вблизи оси трека, что является определяющим фактором для последующего расчета ТУН.

Математическая постановка задачи базируется на системе дифференциальных уравнений двухтемпературной модели (2.12)-(2.13), аналогичной рассмотренной в разделе 2.2, но с модифицированной функцией источника [37-40, 102]: $A_e(r, t) = bS_e f(t)D(r)$, где $f(t) = \exp[-(t - t_0)^2/(2t_0^2)]$ характеризует

гауссово распределение импульса во времени, а $D(r) = \exp(-r/r_0)$ описывает экспоненциальное убывание плотности выделенной энергии по радиальной координате. Величина b , определяемая из условия нормировки (1.11), имеет следующий упрощенный вид: $b = [(2\pi)^{3/2} \cdot 0.84 \cdot r_0^2 \cdot t_0]^{-1}$, (Подробный вывод интеграла приведен в Приложении VII.).

Для аналитического решения системы (2.27) - (2.8) применяются методы интегральных преобразований Лапласа по t и Ханкеля по r . С учетом начальных и граничных условий (2.14) решение системы уравнений (2.31) - (2.32) было получено в предыдущем разделе 2.2 в виде (2.27) и (2.28).

Для радиальной части функций источника, используя свойства преобразования Ханкеля, получим:

$$\tilde{D}(s) = \int_0^\infty e^{-r/r_0} J_0(rs) r dr = r_0^2 (1 + r_0^2 s^2)^{-3/2}, \quad (2.31)$$

и для временной части преобразование Лапласа получим выражение через функцию ошибок (erf):

$$\hat{f}(p) = \int_0^\infty e^{-(t-t_0)^2/(2t_0^2)} e^{-pt} dt = t_0 \sqrt{\frac{\pi}{2}} \left[1 - erf\left(\frac{pt_0 - 1}{\sqrt{2}}\right) \right] \exp\left[\frac{(pt_0 - 1)^2 - 1}{2}\right]$$

(Подробные выводы интегралов приведены в Приложениях VI и VIII).

Подставляя выражения (2.31) в полученные решения для электронной (2.27) и решеточной (2.28) подсистем, получим:

$$T_e'(r, t) = \frac{bS_e r_0^2}{C_e} \int_0^\infty \frac{J_0(rs)}{(1 + r_0^2 s^2)^{3/2}} \times \\ \times \left[\int_0^t f(\tau) \frac{(p_1 + g/C_i)e^{p_1(t-\tau)} - (p_2 + g/C_i)e^{p_2(t-\tau)}}{p_1 - p_2} d\tau \right] s ds, \quad (2.32)$$

$$T_i'(r, t) = \frac{bS_e g}{2C_e C_i} \int_0^\infty \frac{J_0(rs)}{(1 + r_0^2 s^2)^{3/2}} \times \left[\int_0^t f(\tau) \frac{e^{p_1(t-\tau)} - e^{p_2(t-\tau)}}{p_1 - p_2} d\tau \right] s ds, \quad (2.33)$$

где $f(t) = \exp[-(t - t_0)^2/(2t_0^2)]$.

Полученные уравнения (2.32) и (2.33) представляют собой аналитическое решение выше сформулированной задачи теплопроводности и описывают кинетику сверхбыстрого нестационарного нагрева мишени ионизирующим импульсом гауссовой формы, формирующим экспоненциальный трек.

На основы выражений (2.33) и (2.34) нами был выполнен численный расчет температурного поля для различных металлов (Ni, Cu, Au), теплофизические параметры которых при $T = 300$ К приведены в таблице 2.1. Результаты расчетов представлены на рисунках 2.8 - 2.10.

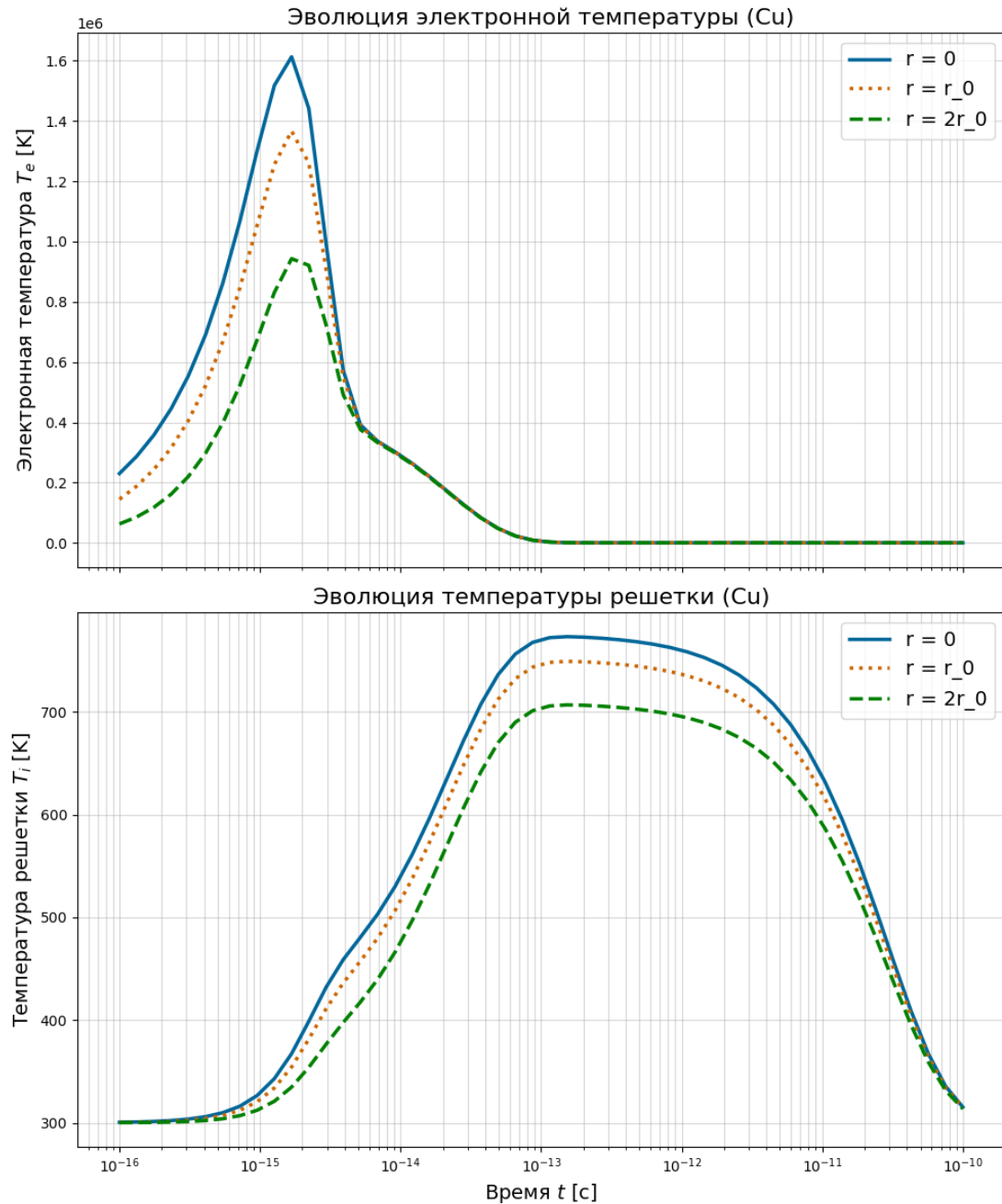


Рис. 2.8. Временная зависимость температуры электронного газа (верхний) и решетки (нижний) пластинки меди (Cu) при облучении 5 МэВ/а.е.м. ионов урана, различных радиальных удалений $r = 0, r = r_0, r = 2r_0$, $t_0 = 1$ фс.

Анализ пространственно-временной динамики температурных полей в меди (Cu), представленный на рис. 2.8, подтверждает фундаментальную роль локализации начального энерговклада вдоль траектории иона. В центре трека ($r = 0$) наблюдается экстремальный разогрев электронной подсистемы до значений $T_e \approx 1.6 \times 10^6 \text{ K}$, что соответствует моменту завершения действия ионного импульса ($t \approx t_0 = 1 \text{ фс}$). С увеличением радиального расстояния до $r = r_0$ и $r = 2r_0$ пиковые значения электронной температуры закономерно снижаются, что продиктовано экспоненциальной формой функции пространственного распределения источника $D(r) = \exp(-r/r_0)$. Процесс нагрева кристаллической решетки T_i носит выраженный инерционный характер, достигая своего максимума на временах порядка $10^{-13} - 10^{-12} \text{ с}$, что находится в строгом соответствии с теоретическим временем электрон-фононной релаксации $\tau_{ep} = C_e/g$. Характерно, что после установления локального термодинамического равновесия ($T_e \approx T_i$) при $t > 10 \text{ пс}$, кривые для различных радиусов начинают сближаться, указывая на переход от стадии интенсивного энергообмена к стадии радиальной диффузии тепла в объем материала.

Сравнительный анализ временной эволюции температур для никеля, меди и золота, представленный на рис. 2.9, демонстрирует определяющее влияние константы электрон-фононной связи g на эффективность радиационного нагрева решетки. В золоте (Au), обладающем минимальным значением $g \approx 2.3 \times 10^{16} \text{ Вт}/(\text{м}^3 \cdot \text{К})$, энергия длительное время удерживается в электронной подсистеме, что приводит к высокому электронному перегреву ($T_e > 600\,000 \text{ K}$), но крайне незначительному изменению температуры ионной решетки.

Противоположная картина наблюдается в никеле (Ni): благодаря аномально высокому коэффициенту связи $g \approx 107 \times 10^{16} \text{ Вт}/(\text{м}^3 \cdot \text{К})$, энергия стремительно перекачивается из электронной плазмы в ионный остов. Это обуславливает наиболее интенсивный разогрев решетки ($T_i \approx 2400 \text{ K}$) среди исследуемых металлов, что значительно превышает порог плавления и ведет к необратимым структурным изменениям и формированию треков. Медь (Cu)

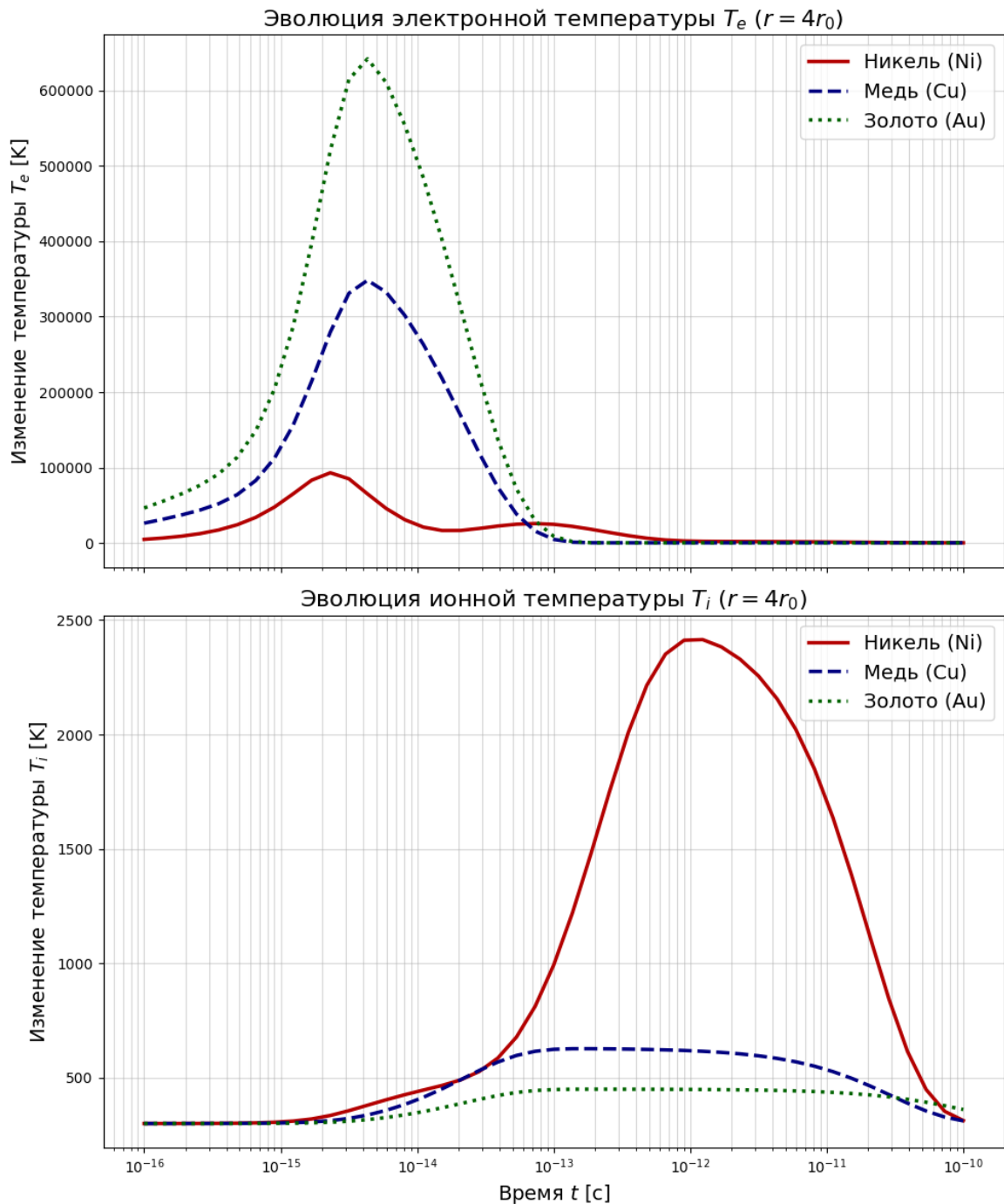


Рис. 2.9. Сравнительный анализ температурного отклика электронной подсистемы ΔT_e (верхний график) и кристаллической решетки ΔT_i (нижний график) для различных металлов (Ni, Cu, Au) на расстоянии $r = 4r_0$ от оси трека.

занимает промежуточное положение, где высокая электронная теплопроводность κ_e конкурирует с процессами релаксации, обеспечивая эффективный вынос тепла из зоны возбуждения.

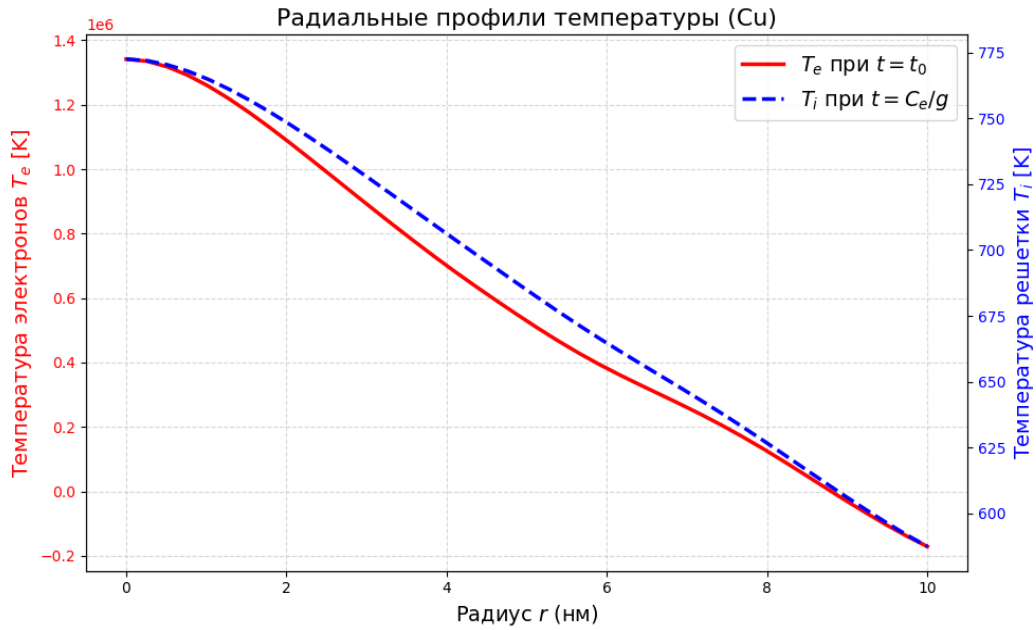


Рис. 2.10. Радиальные профили температуры электронной подсистемы T_e (сплошная линия) и кристаллической решетки T_i (штриховая линия) меди (Cu) в моменты достижения ими максимальных значений.

Радиальные распределения температур T_e и T_i в меди (см. рис. 2.10), зафиксированные в моменты их соответствующих максимумов, наглядно иллюстрируют пространственную структуру термического пика. Профиль электронной температуры при $t = t_0$ в точности повторяет экспоненциальную геометрию начального энерговклада, характеризуясь резким градиентом в нанометровой окрестности оси трека.

Профиль температуры решетки T_i , зафиксированный в момент $t = C_e/g$, сохраняет общую тенденцию к локализации, однако демонстрирует некоторое «расплывание» и более пологий характер по сравнению с электронным фронтом. Использование двух шкал на графике позволяет сопоставить энергетические масштабы: при электронном нагреве порядка 10^6 К, решетка разогревается до температур ≈ 775 К. Наличие столь высоких пространственных градиентов температуры (dT_i/dr) является первичным источником возникновения ТУН, инициирующих генерацию АВ в гиперзвуковом диапазоне.

2.4. Формирование температурных полей в металлических мишенях под действием быстрых тяжелых ионов с учетом затухания электронных потерь энергии по глубине (аппроксимация Лямшева)

В рамках продолжения исследования, представленного в первой главе, данный раздел посвящен математическому моделированию формирования температурных полей в металлических мишенях при воздействии БТИ на основе МТП. Процесс диссипации энергии БТИ характеризуется сверхбыстрой передачей энергии электронной подсистеме, что приводит к возникновению сильнонеравновесного состояния [1-3]. Поскольку для БТИ электронные потери энергии S_e на порядки превосходят ядерные потери S_n , в рамках нашего исследования принимается обоснованное физическое допущение: мы полностью пренебрегаем прямым тепловыделением в ионной подсистеме, принимая источник энергии решетки $A_i \approx 0$ [1, 31, 45, 47]. Таким образом, вся энергия падающего иона передается через функцию источника тепла в электронной подсистеме A_e .

В классических подходах при моделировании термических пиков электронные потери энергии S_e обычно аппроксимируются как макроскопически постоянная величина вдоль значительной части пути иона. Математически это выражается профилем энерговыведения, пропорциональным $S_e \cdot \mu(z)$, где функция глубинного распределения принимается равной единице: $\mu(z) = 1$ или как сигмоидальную функцию [37-40]. Однако для точного описания акустических откликов такой усредненный подход недостаточен.

В данном исследовании мы отходим от константного приближения и предполагаем, что пространственное распределение источника энергии A_e затухает по мере прохождения иона. Мы применяем аппроксимацию Лямшева [57], где профиль энерговыведения определяется как $S_e \cdot \mu(z)$, а функция пространственного затухания электронных каскадов принимает экспоненциальный вид: $\mu(z) = \exp(-\mu_0 z)$, где μ_0 – коэффициент затухания энергетического каскада.

Такое приближение позволяет строго аналитически учесть затухание электронных потерь энергии по мере проникновения иона вглубь материала, что, согласно Лямшеву, является критически важным для получения точных аналитических решений и описания основных принципиальных особенностей последующей генерации термоупругих волн [52-57, 70]. Использование данной модифицированной функции источника A_e позволяет свести задачу к системе связанных дифференциальных уравнений, решение которых в интегральных преобразованиях дает наглядную картину эволюции тепловых процессов на нанометровых масштабах [22, 114].

Для описания динамики нагрева электронной подсистемы в начальные моменты времени ($t < \tau_{ep}$), когда теплообмен с решеткой еще не привел к их термическому равновесию, разность температур велика. В этом случае правомерно допущение $T_e - T_i \approx T_e$, что позволяет упростить уравнение энергетического баланса для электронов [69, 101, 118]. Применяя к линеаризованному уравнению теплопроводности (2.1) интегральное преобразование Лапласа по времени ($t \rightarrow p$) и преобразование Ханкеля нулевого порядка по радиальной координате ($r \rightarrow s$), получаем уравнение:

$$C_e p \tilde{\tilde{T}}_e(p, s, z) + k_e s^2 \tilde{\tilde{T}}_e(p, s, z) - k_e \frac{\partial^2 \tilde{\tilde{T}}_e(p, s, z)}{\partial z^2} + g \tilde{\tilde{T}}_e(p, s, z) = \tilde{\tilde{Q}}(p, s, z). \quad (2.34)$$

В общем случае, без учета временного упрощения для ионной подсистемы, уравнение баланса энергии решетки (2.2) в тех же преобразованиях сохраняет член электрон-фононного взаимодействия в полной форме:

$$C_i p \tilde{\tilde{T}}_i(p, s, z) + g \left(\tilde{\tilde{T}}_i(p, s, z) - \tilde{\tilde{T}}_e(p, s, z) \right) = 0 \quad (2.35)$$

Для нахождения решения относительно глубины z , перегруппируем члены уравнения (2.34). Введем параметр q^2 , который характеризует эффективную длину диффузии и релаксации энергии в электронной системе:

$$q^2 = \frac{C_e p + g}{k_e} + s^2$$

С учетом введенного обозначения, уравнение для температуры электронов (2.34) принимает вид неоднородного дифференциального уравнения второго порядка:

$$\frac{\partial^2 \tilde{T}_e}{\partial z^2} - q^2 \tilde{T}_e = -\frac{bS_e \tilde{f}(p) \bar{D}(s)}{k_e} e^{-\mu_0 z}, \quad (2.36)$$

где $\tilde{f}(p) = \int_0^\infty e^{-\alpha t} e^{-pt} dt = \frac{1}{p+\alpha}$ и $\bar{D}(s) = \int_0^\infty e^{-r^2/r_0^2} J_0(rs) r dr = \frac{r_0^2}{2} e^{-r_0^2 s^2/4}$ (Подробные выводы интегралов приведены в Приложениях V и VI.).

Для решения уравнение (2.36) применим метод вариации произвольных постоянных. Сначала рассмотрим однородное уравнение $\tilde{T}_e'' - q^2 \tilde{T}_e = 0$, общее решение которого представляется в виде суммы экспоненциальных функций: $\tilde{T}_{e,\text{одн}} = Ae^{qz} + Be^{-qz}$. Согласно методу Лагранжа, будем искать решение неоднородного уравнения, полагая A и B функциями от z .

Подставляя предполагаемое решение в исходное уравнение и накладывая стандартное условие на производные вариационных коэффициентов ($A'e^{qz} + B'e^{-qz} = 0$), мы получаем систему линейных алгебраических уравнений для $A'(z)$ и $B'(z)$. Решение этой системы позволяет определить частное решение, обусловленное наличием источника тепла. Интегрируя полученные выражения с учетом экспоненциального характера источника по Лямшеву, мы находим, что вклад источника пропорционален $\exp(-\mu_0 z)$, деленному на разность квадратов характеристических параметров. Таким образом, общее решение для температуры электронной подсистемы в пространстве образов до наложения граничных условий записывается как:

$$\tilde{T}_e(p, s, z) = Ae^{qz} + Be^{-qz} + \frac{bS_e \tilde{f}(p) \bar{D}(s)}{k_e(q^2 - \mu_0^2)} e^{-\mu_0 z} \quad (2.37)$$

Для завершения решения необходимо применить граничные условия, определяемые физикой процесса в полу-бесконечной среде. Из условия ограниченности решения при $z \rightarrow \infty$ следует, что температура не может неограниченно расти, следовательно, коэффициент при положительной экспоненте должен быть равен нулю ($A = 0$). На облучаемой поверхности ($z = 0$) теплообмен с окружающей средой (вакуумом) отсутствует, что соответствует адиабатическому условию: $\partial \tilde{T}_e / \partial z = 0$. Дифференцируя выражение (2.37) по z и приравнивая его к нулю в точке $z = 0$, находим значение константы B :

$$B = -\frac{\mu_0 b S_e \tilde{f}(p) \bar{D}(s)}{q k_e (q^2 - \mu_0^2)}$$

Подставляя найденный коэффициент B обратно в общее решение, получаем окончательное выражение для трансформанты температуры электронной подсистемы:

$$\tilde{T}_e(p, s, z) = \frac{b S_e \tilde{f}(p) \bar{D}(s)}{k_e (q^2 - \mu_0^2)} \left[e^{-\mu_0 z} - \frac{\mu_0}{q} e^{-qz} \right] \quad (2.38)$$

Подставляя (2.37) в уравнении (2.35), находим соответствующее распределение для температуры ионной решетки:

$$\tilde{T}_i(p, s, z) = \frac{g}{C_i p + g} \tilde{T}_e(p, s, z) = \frac{g b S_e \tilde{f}(p) \bar{D}(s)}{(C_i p + g) k_e (q^2 - \mu_0^2)} \left[e^{-\mu_0 z} - \frac{\mu_0}{q} e^{-qz} \right]. \quad (2.39)$$

Для получения окончательного аналитического вида выражений (2.38) и (2.39), удобного для последующего обратного преобразования Лапласа по теореме о вычетах, необходимо разложить знаменатели на множители по переменной p . Исходя из параметра q^2 , преобразуем резонансный член $k_e(q^2 - \mu_0^2)$, входящий в знаменатель обеих функций.

Путем простых алгебраических преобразований перегруппируем слагаемые:

$$k_e \left(\frac{C_e p + g}{k_e} + s^2 - \mu_0^2 \right) = C_e p + g + k_e s^2 - k_e \mu_0^2 = C_e \left(p + \frac{g + k_e s^2 - k_e \mu_0^2}{C_e} \right)$$

Введем обозначение для корня p_1 , при котором данный знаменатель обращается в нуль:

$$p_1 = -\frac{g + k_e s^2 - k_e \mu_0^2}{C_e}$$

Тогда резонансный множитель принимает вид $C_e(p - p_1)$. Далее, рассмотрим внутренний множитель в квадратных скобках, содержащий корень из q^2 .

Вынося $\chi_e = \frac{k_e}{C_e}$ из-под знака корня, представим его через разность $(p - p_2)$:

$$\sqrt{\frac{C_e p + g}{k_e} + s^2} = \sqrt{\frac{1}{\chi_e} \left(p + \frac{g + k_e s^2}{C_e} \right)} = \frac{\sqrt{p - p_2}}{\sqrt{\chi_e}}$$

где

$$p_2 = -\frac{g + k_e s^2}{C_e}$$

С учетом выполненных преобразований, окончательный вид выражении температуры электронной подсистемы (2.38) записывается следующим образом:

$$\tilde{T}_e(p, s, z) = \frac{bS_e \tilde{f}(p) \bar{D}(s)}{C_e(p - p_1)} \left[e^{-\mu_0 z} - \frac{\mu_0 \sqrt{\chi_e}}{\sqrt{p - p_2}} e^{-z \frac{\sqrt{p - p_2}}{\sqrt{\chi_e}}} \right] \quad (2.40)$$

Для ионной подсистемы, учитывая инерционное звено $(C_i p + g)$, выражение (2.39) принимает вид:

$$\tilde{T}_i(p, s, z) = \frac{gbS_e \tilde{f}(p) \bar{D}(s)}{(C_i p + g) C_e(p - p_1)} \left[e^{-\mu_0 z} - \frac{\mu_0 \sqrt{\chi_e}}{\sqrt{p - p_2}} e^{-z \frac{\sqrt{p - p_2}}{\sqrt{\chi_e}}} \right] \quad (2.41)$$

Для получения окончательного аналитического вида температурных полей в пространстве преобразования Лапласа, подставим временную функцию источника $f(p) = \frac{1}{p - p_0}$, где $p_0 = -\alpha$ является параметром экспоненциального затухания импульса. С учетом ранее введенных корней p_1 и p_2 , проведем факторизацию выражений для электронной и ионной подсистем.

Перепишем выражение (2.41) в виде разности двух компонент, описывающих объемный нагрев и влияние поверхности:

$$\tilde{T}_e(p, s, z) = \theta_1(p) - \theta_2(p)\theta_3(p), \quad (2.42)$$

где

$$\theta_1(p) = \frac{bS_e \bar{D}(s) e^{-\mu_0 z}}{C_e(p - p_0)(p - p_1)}, \quad \theta_2(p) = \frac{1}{\sqrt{p - p_2}}, \quad \theta_3(p) = \frac{bS_e \bar{D}(s) \mu_0 \sqrt{k_e} e^{-z \frac{\sqrt{p - p_2}}{\sqrt{\chi_e}}}}{C_e^{3/2}(p - p_0)(p - p_1)}.$$

Для ионной подсистемы, с учетом действия электрон-фононной связи, выражение для трансформанты $\tilde{T}_i$ принимает аналогичную структурную форму:

$$\tilde{T}_i(p, s, z) = \theta_4(p) - \theta_2(p)\theta_3^*(p), \quad (2.43)$$

$$\text{где } \theta_4(p) = \frac{gbS_e \bar{D}(s) e^{-\mu_0 z}}{C_i C_e(p - p_3)(p - p_0)(p - p_1)}, \quad \theta_3^*(p) = \frac{gbS_e \bar{D}(s) \mu_0 \sqrt{k_e}}{C_i C_e^{3/2}(p - p_3)(p - p_0)(p - p_1)} e^{-z \frac{\sqrt{p - p_2}}{\sqrt{\chi_e}}}.$$

Для нахождения оригиналов температурных полей в физическом пространстве времени необходимо выполнить обратное преобразование Лапласа от полученных спектральных функций. Обратное преобразование первой спектральной функции $\theta_1(p)$, описывающей первичный вклад объемного поглощения энергии по Лямшеву, находится с использованием теоремы о раз-

ложении для двух простых полюсов. Результат представляет собой разность двух экспонент, характеризующих конкуренцию между затуханием внешнего источника и собственной тепловой релаксацией электронной подсистемы:

$$\theta_1(t) = \frac{bS_e \bar{D}(s) e^{-\mu_0 z}}{C_e(p_0 - p_1)} (e^{p_0 t} - e^{p_1 t}).$$

Для функции $\theta_2(p)$, определяющей ядро диффузионного процесса, оригинал находится непосредственно из табличных значений преобразования для степенных функций с дробным показателем. С учетом смещения аргумента на величину p_2 , выражение принимает следующий вид $\theta_2(t) = \frac{e^{p_2 t}}{\sqrt{\pi t}}$.

Расчет оригинала для ионной компоненты $\theta_4(t)$ требует учета инерционности кристаллической решетки, что математически выражается появлением третьего полюса $p_3 = -g/C_i$. Используя обобщенную теорему о вычетах для случая трех простых полюсов, получаем сумму трех экспоненциальных членов:

$$\theta_4(t) = \frac{gbS_e \bar{D}(s) e^{-\mu_0 z}}{C_i C_e} \left[\frac{e^{p_3 t}}{(p_3 - p_0)(p_3 - p_1)} + \frac{e^{p_0 t}}{(p_0 - p_3)(p_0 - p_1)} + \frac{e^{p_1 t}}{(p_1 - p_3)(p_1 - p_0)} \right].$$

Наиболее сложную структуру имеют функции $\theta_3(p)$ и $\theta_3^*(p)$, содержащие экспоненциальный множитель с корнем из оператора Лапласа, что физически соответствует движению теплового фронта от поверхности $z = 0$. Для нахождения их оригиналов в общем виде воспользуемся свойством линейности и формулой для обратного преобразования выражения типа $(p - n)^{-1} \exp\left(-\frac{z}{\sqrt{\chi_e}} \sqrt{p - p_2}\right)$. Представим результат через дополнительную функцию ошибок $\text{erfc}(x)$

$$\theta_3(t) = \frac{bS_e \bar{D}(s) \mu_0 \sqrt{k_e}}{C_e^{3/2} (p_0 - p_1)} [\Psi(p_0) - \Psi(p_1)],$$

где вспомогательная функция Ψ определяется как:

$$\Psi(n) = \frac{e^{nt}}{2} \left[e^{-\frac{z\sqrt{n-p_2}}{\sqrt{\chi_e}}} \text{erfc}\left(\frac{z}{2\sqrt{\chi_e t}} - \sqrt{(n-p_2)t}\right) + e^{\frac{z\sqrt{n-p_2}}{\sqrt{\chi_e}}} \text{erfc}\left(\frac{z}{2\sqrt{\chi_e t}} + \sqrt{(n-p_2)t}\right) \right].$$

Аналогичным образом, оригинал $\theta_3^*(t)$ для ионной подсистемы строится на основе суперпозиции функций Ψ для трех полюсов p_0, p_1 и p_3 . Окончательный

вид оригинала $\theta_3^*(t)$ для ионной подсистемы (решетки) записывается в следующем виде:

$$\theta_3^*(t) = \frac{gbS_e\bar{D}(s)\mu_0\sqrt{k_e}}{C_iC_e^{3/2}} \left[\frac{\Psi(p_0)}{(p_0-p_1)(p_0-p_3)} + \frac{\Psi(p_1)}{(p_1-p_0)(p_1-p_3)} + \frac{\Psi(p_3)}{(p_3-p_0)(p_3-p_1)} \right].$$

Выполняя обратное преобразование Ханкеля нулевого порядка от функций (2.42) и (2.43), получим общие выражения ТП. Окончательное выражение для пространственно-временного распределения температуры электронной подсистемы принимает вид:

$$T_e'(r, z, t) = \int_0^\infty \frac{bS_e\bar{D}(s)J_0(sr)}{C_e(p_0-p_1)} \times \\ \times [e^{-\mu_0 z}(e^{p_0 t} - e^{p_1 t}) - \sqrt{\chi_e}\mu_0(\Omega(p_0) - \Omega(p_1))]sds \quad (2.44)$$

где

$$\Omega(n) = \frac{e^{nt}}{2\sqrt{n-p_2}} \left[e^{-\frac{z\sqrt{n-p_2}}{\sqrt{\chi_e}}} \operatorname{erfc}\left(\frac{z}{2\sqrt{\chi_e t}} - \sqrt{(n-p_2)t}\right) - e^{\frac{z\sqrt{n-p_2}}{\sqrt{\chi_e}}} \operatorname{erfc}\left(\frac{z}{2\sqrt{\chi_e t}} + \sqrt{(n-p_2)t}\right) \right].$$

Для ионной подсистемы, эволюция которой детерминирована скоростью электрон-фононного обмена g , распределение температуры в реальном пространстве записывается аналогичным образом:

$$T_i(r, z, t) = \int_0^\infty \frac{gbS_e\bar{D}(s)}{C_iC_e} \left\{ e^{-\mu_0 z} \left[\frac{e^{p_3 t}}{(p_3-p_0)(p_3-p_1)} + \frac{e^{p_0 t}}{(p_0-p_3)(p_0-p_1)} + \frac{e^{p_1 t}}{(p_1-p_3)(p_1-p_0)} \right] - \right. \\ \left. - \mu_0\sqrt{\chi_e} \left[\frac{\Omega(p_0)}{(p_0-p_1)(p_0-p_3)} + \frac{\Omega(p_1)}{(p_1-p_0)(p_1-p_3)} + \frac{\Omega(p_3)}{(p_3-p_0)(p_3-p_1)} \right] \right\} J_0(sr)sds \quad (2.45)$$

Полученные аналитические формы (2.44) и (2.45) представляют собой наиболее общее решение задачи теплового пика для полубесконечной среды с экспоненциальным затуханием поглощаемой энергии. Эти уравнения позволяют рассчитать пространственные производные ($\partial T_{e,i}/\partial z$ и $\partial T_{e,i}/\partial r$), которые являются вынуждающими силами в динамических уравнениях термоупругости, инициирующих распространение АИ в металлической мишени.

Для проведения количественного анализа температурных полей в рамках предложенной модели необходимо определить значения линейного коэффициента затухания μ_0 для выбранных металлических мишеней (Cu, Ni, Au). Физический смысл данного параметра в аппроксимации Лямшева заключается в описании интенсивности пространственного рассеяния энергии

электронного каскада по мере продвижения иона вглубь материала [57]. Численные значения μ_0 определяются на основе данных о пробегах ионов урана (U) с энергией 5 МэВ/а.е.м., полученных с помощью программного комплекса SRIM [22, 86]. Для меди и никеля, обладающих схожими плотностями и атомными номерами, значения коэффициента принимаются в диапазоне $0,04\text{--}0,06\text{ мкм}^{-1}$, что соответствует эффективной глубине проникновения порядка 25–30 мкм [22]. В случае золота, вследствие его значительно более высокой электронной плотности и тормозной способности, наблюдается резкое сокращение пробега иона до 14–18 мкм, что обуславливает увеличение коэффициента затухания до значений $\mu_0 \approx 0,08\text{--}0,11\text{ мкм}^{-1}$. Это соответствует эффективной глубине энергосвечения, или «длине каскада» $L_p = 1/\mu_0$, составляющей примерно 15–25 мкм [71].

Величина b , определяемая из условия нормировки (1.11), имеет следующий упрощенный вид: $b = \alpha/(\pi r_0^2)$, (см. Приложение IV.).

Используя выражения (2.4.16) и (2.4.17) мы провели численный расчет поле температуры для пластинки из меди (Cu), для которой теплофизические параметры которой при $T = 300\text{ К}$ приведены в таблицах 2.1 и 3.1. Результаты расчеты иллюстрированы на рисунках 2.11–2.14.

На рис. 2.11 представлена временная динамика температур электронной и ионной подсистем меди на поверхности мишени ($z = 0$). Графики наглядно иллюстрируют сверхбыстрый нагрев электронной подсистемы, достигающей пикового значения порядка $3,5 \times 10^6\text{ К}$ в центре трека к моменту окончания действия импульса ($t = 1\text{ фс}$). Последующий резкий спад T_e обусловлен интенсивной передачей энергии кристаллической решетке за счет электрон-фононного взаимодействия и радиальным оттоком тепла благодаря высокой электронной теплопроводности меди.

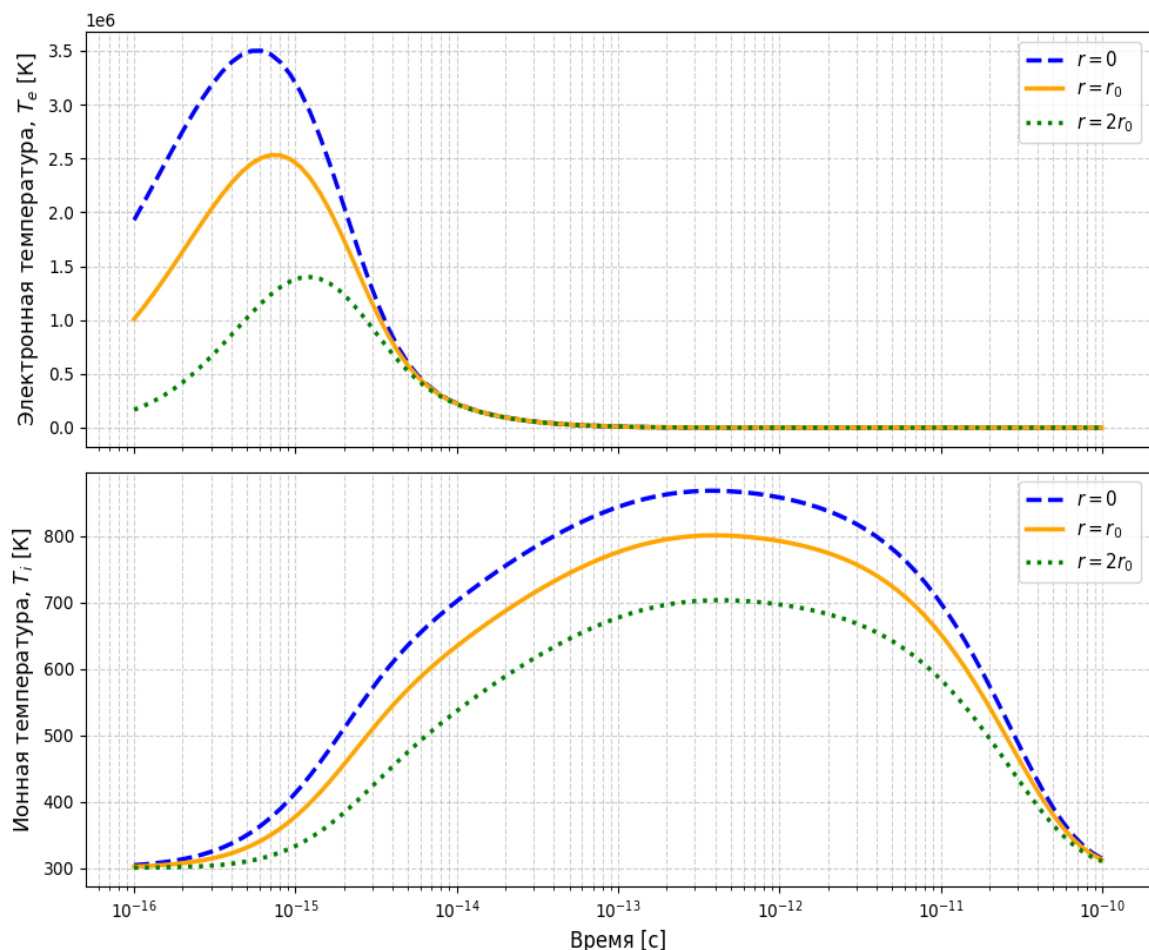


Рис. 2.11. Временная эволюция температур электронной подсистемы T_e (верхний график) и кристаллической решетки T_i (нижний график) меди (Cu) на различных радиальных расстояниях ($r = 0, r = r_0, r = 2r_0$) с учетом затухания ионизационных потерь по глубине.

Температура кристаллической решетки T_i , напротив, демонстрирует инерционный характер нагрева, выходя на плато (≈ 870 К в центре трека) в пикосекундном диапазоне (около $0.3 - 0.5$ пс). Время достижения этого максимума строго коррелирует с характерным временем электрон-фононной релаксации $\tau_{ep} = C_e/g$. На периферии трека ($r = 2r_0$) амплитуды температур существенно ниже, однако общая динамика релаксации сохраняется, подтверждая доминирующую роль электрон-фононного обмена на начальном этапе формирования трека.

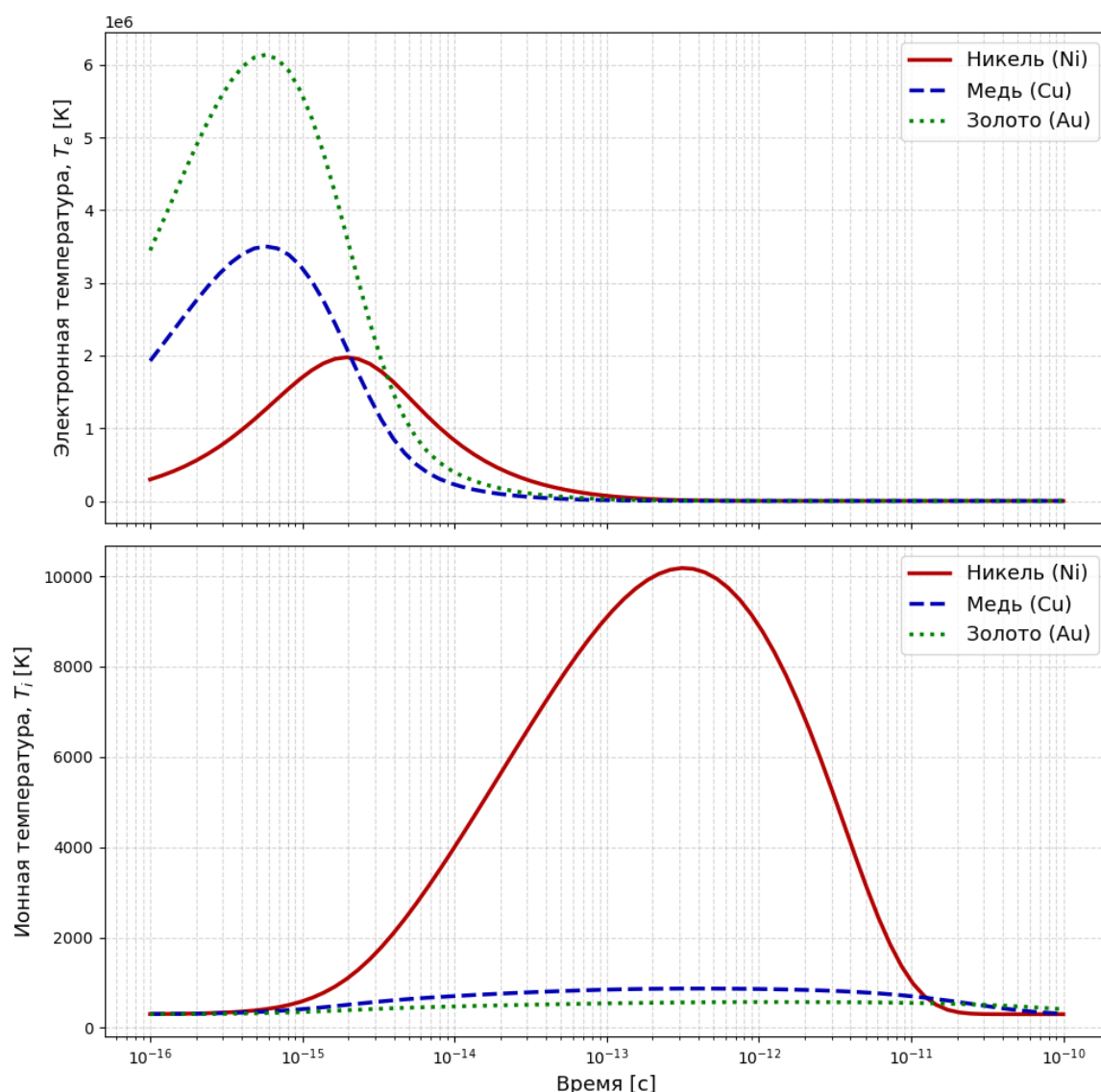


Рис. 2.12. Сравнительный анализ временной эволюции температур электронной подсистемы T_e (верхний график) и кристаллической решетки T_i (нижний график) для различных металлов (Ni, Cu, Au) на поверхности мишени в центре оси трека ($r = 0$, $z = 0$) с учетом затухания ионизационных потерь по Лямшеву.

На рис. 2.12 сравнивается временная динамика температур никеля, меди и золота. Верхний график показывает, что в золоте наблюдается максимальная электронная температура ($T_e > 6 \times 10^6$ K), так как минимальная константа электрон-фононной связи удерживает энергию в электронной подсистеме. Нижний график демонстрирует обратный эффект для ионной температуры (T_i): высокая константа связи в никеле приводит к стремительной пере-

даче энергии решетке, нагревая ее примерно до 10000 К (выше порога плавления). В то же время решетки благородных металлов почти не нагреваются благодаря эффективной диссипации энергии за счет высокой электронной теплопроводности.

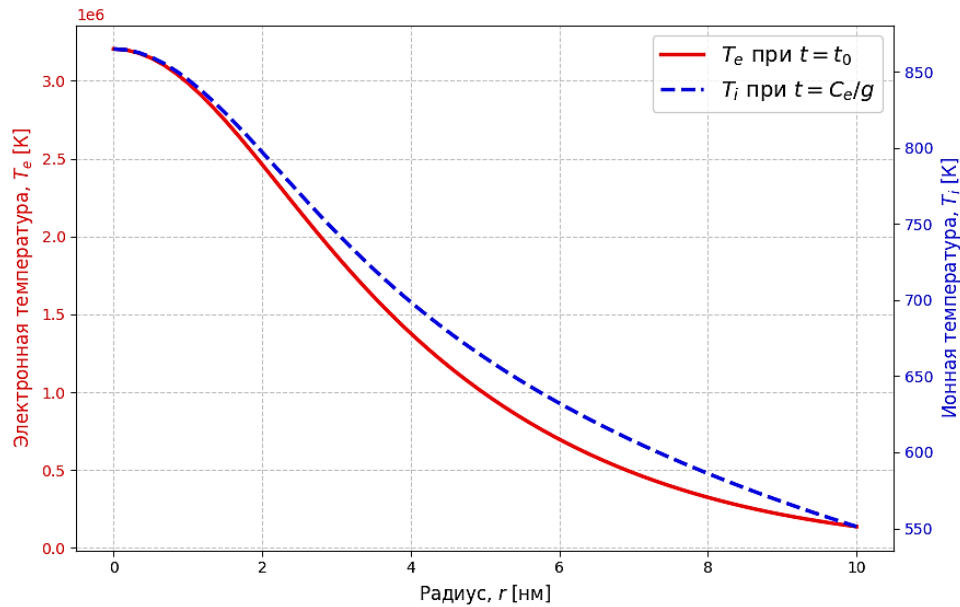


Рис. 2.13. Радиальные профили температуры электронной подсистемы T_e (сплошная линия) в момент $t = t_0$ и кристаллической решетки T_i (штриховая линия) в момент $t = C_e/g$ для меди (Cu).

На рис. 2.13 показаны радиальные распределения температур электронной подсистемы и кристаллической решетки меди, зафиксированные в моменты достижения ими своих максимальных значений. Сплошная красная кривая отражает профиль T_e в момент окончания импульса ($t = 1$ фс), четко повторяя исходное экспоненциально-гауссово распределение плотности выделенной энергии с острой локализацией в нанометровой окрестности оси трека.

Штриховая кривая иллюстрирует радиальный профиль температуры решетки T_i в момент времени $t = C_e/g \approx 0.22$ пс. Как видно из графика, профиль ионной температуры становится несколько более уширенным по сравнению с изначальным электронным откликом, что свидетельствует о начале

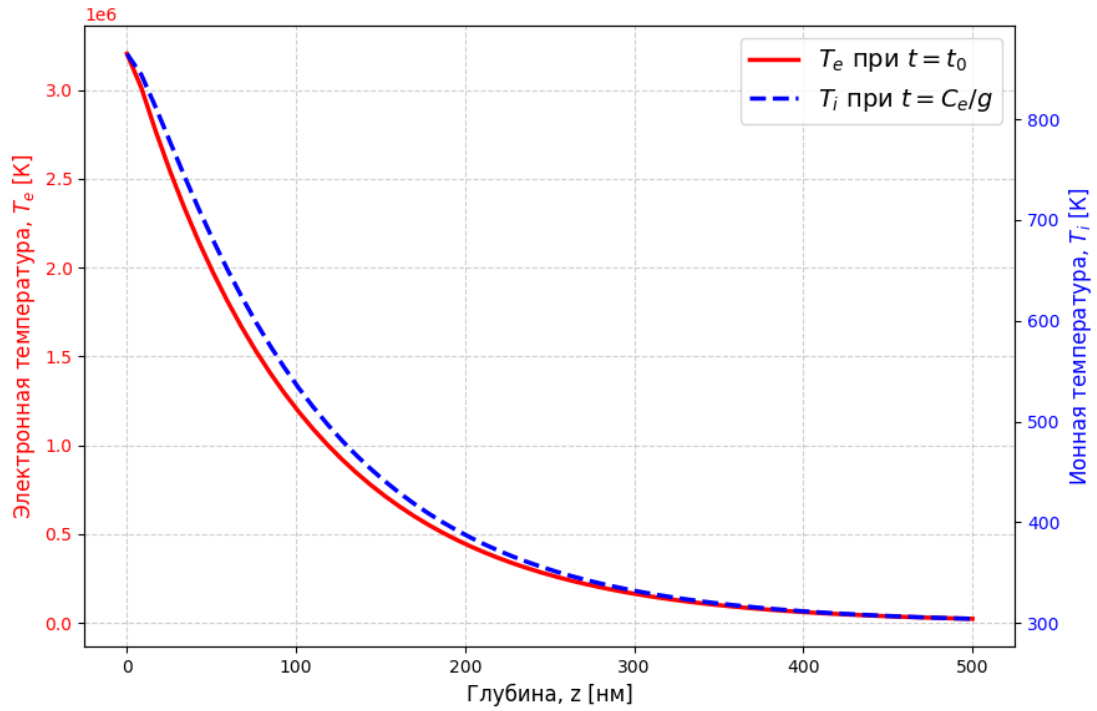


Рис. 2.14. Распределение температур электронной подсистемы T_e и решетки T_i по глубине мишени z (вдоль оси $r = 0$) в моменты их максимальных значений ($t = t_0$ и $t = C_e/g$)

процессов радиальной тепловой диффузии. Сохранение высоких пространственных градиентов температуры (спад от ≈ 870 K в центре до $r = 10$ нм) формирует мощные радиальные ТУН в объеме материала.

Рис. 2.14 демонстрирует распределение температур T_e (при $t = t_0$) и T_i (при $t = C_e/g$) по глубине проникновения иона строго по оси трека. Внедрение аппроксимации Лямшева, $\mu(z) = e^{-\mu_0 z}$, в аналитические решения (2.4.16) и (2.4.17) позволяет наглядно проследить экспоненциальное затухание температурного поля по мере продвижения иона вглубь мишени. Максимальный разогрев обеих подсистем ожидаемо наблюдается на поверхности облучаемого образца ($z = 0$), после чего происходит их монотонный спад.

Профили затухания для электронной и ионной подсистем геометрически подобны, демонстрируя полное угасание теплового всплеска (возврат к фоновым 300 K) на глубине проникновения порядка 500 нм. Наличие столь выраженного продольного градиента температуры $\partial T_{e,i} / \partial z$ имеет принципи-

альное значение: именно эта пространственная неоднородность выступает в качестве основной движущей силы для нормальной компоненты ТУН, инициирующих генерацию продольных АВ, распространяющихся вглубь металла.

2.5. Формирование температурных полей в полубесконечных образцах при воздействии ионного пучка, представленного в виде эквивалентного поверхностного источника тепла

Следует подчеркнуть, что глубина проникновения ионов в вещество существенно зависит от их начальной кинетической энергии, массы иона и свойств материала мишени. В диапазоне средних энергий (порядка 50–80 кэВ) пробег ионов, как правило, составляет десятки нанометров, тогда как при высоких энергиях (более 1 МэВ) глубина проникновения может достигать единиц и даже десятков микрометров [22, 45, 76-86]. Современные расчётные методы (например, SRIM) позволяют количественно оценивать эти параметры для конкретных систем [86, 92]. В классической постановке задач взаимодействие БТИ с твёрдыми телами в рамках МТП, энерговыделение рассматривается как объёмный источник, распределённый вдоль траектории иона на глубину. Вместе с тем, при анализе ранней стадии эволюции системы, а также процессов, локализованных вблизи поверхности, пространственная неоднородность источника по глубине может быть эффективно учтена путём введения эквивалентного граничного условия для теплового потока на поверхности мишени. В этом случае объёмное энерговыделение, обусловленное электронными потерями энергии иона, аппроксимируется поверхностным источником, что значительно упрощает теоретическое описание взаимодействия потоков частиц с конденсированными средами [121].

Целью настоящего раздела является теоретическое исследование формирования температурных полей в металлах в условиях эффективного поверхностного возбуждения электронной подсистемы. Анализ проводится в рамках упрощенной МТП для случая, когда временной профиль интенсивно-

сти потока описывается экспоненциальным законом затухания, а радиальное распределение имеет гауссов вид. В работе представлено аналитическое исследование динамики температуры электронов в указанных условиях и определены границы применимости предложенного приближения. Для описания особенностей этого процесса, как правило, используется модель теплового пика, согласно которой теплофизические аспекты взаимодействия заряженных частиц с металлом описываются следующей системой двух нелинейных уравнений теплопроводности - для температур электронной $T_e(r, z, t)$ и ионной $T_i(r, z, t)$ подсистем, соответственно [1-4]. Система уравнений (1.8) является достаточно сложной. Обычно она решается численными методами [4, с.6735; 5, с.64; 6, с.2]. Для ее аналитического решения используются некоторые упрощения. Так, например, в работах [13, с.40; 14, с.155], посвященных нагреву металлов импульсным лазерным излучением, учитывалось, что электронная подсистема в проводнике обладает крайне малой теплоемкостью, в то время как теплопроводностью фононной подсистемы можно пренебречь. Учитывая эти обстоятельства, систему уравнений (1)-(2) можно записать в следующем виде:

$$\kappa_e \left(\frac{1}{r} \frac{\partial T_e}{\partial r} + \frac{\partial^2 T_e}{\partial r^2} + \frac{\partial^2 T_e}{\partial z^2} \right) = g(T_e - T_i), \quad (2.46)$$

$$C_i \frac{\partial T_i}{\partial t} = g(T_e - T_i). \quad (2.47)$$

Начальные и граничные условия, необходимые для совместного решения системы уравнений (2.46) - (2.47), можно принять в виде [101, 105, 121, 122]

$$T'_{e,i}(r, z, 0) = 0, \left. \frac{\partial T'_{e,i}(r, z, t)}{\partial r} \right|_{r=0} = 0, -\kappa_e \left. \frac{\partial T'_{e,i}}{\partial z} \right|_{z=0} = A_e(r, t), \quad (2.48)$$

где $A_e(r, t)$ – функция пучка ионов. Следуя [103, 104], вид этой функции можно представить в следующем виде: $A_e(r, t) = b\alpha e^{-\alpha t} e^{-r^2/r_0^2}$, где $\alpha = 1/t_0$.

Выполняя интегральные преобразования Лапласа по t и Ханкеля по r в уравнений (2.46) - (2.47), получим

$$\kappa_e \left(-s^2 \hat{T}'_e + \frac{\partial^2 \hat{T}'_e}{\partial z^2} \right) - g(\hat{T}'_e - \hat{T}'_i) = 0 \quad (2.49)$$

$$\hat{T}'_i = \frac{g}{c_{ip} + g} \hat{T}'_e \quad (2.50)$$

Исключив величину $\hat{T}'_i$ из этой системы, для $\hat{T}'_e$ получим следующее уравнение:

$$\frac{\partial^2 \hat{T}'_e}{\partial z^2} - q^2 \hat{T}'_e = 0, \quad (2.51)$$

где $q(p) = \sqrt{s^2 + \frac{C_i g p}{\kappa_e (C_i p + g)}}$.

Учитывая, что источник локализован поверхностным слоем, решение уравнения (2.51) ищем в виде $\hat{T}'_e = \gamma e^{-qz}$.

Находя величину γ из граничного условия (2.48), будем иметь

$$\hat{T}'_e = \frac{\hat{f}(p) \tilde{D}(s) e^{-qz}}{\kappa_e q},$$

где $\hat{f}(p) = \frac{\alpha}{p+\alpha}$ и $\tilde{D}(s) = \frac{S_e r_0}{2\sqrt{2\pi}} e^{-r_0^2 s^2/4}$ (см. Приложения V и VI.).

Для удобства выражение $\hat{T}'_e$ перепишем в виде

$$\hat{T}'_e(s, z, p) = \frac{\alpha r_0 S_e e^{-r_0^2 s^2/4}}{2\sqrt{2\pi} \kappa_e} \frac{e^{-qz}}{(p+\alpha)q} = \frac{\alpha r_0 S_e e^{-r_0^2 s^2/4}}{2\sqrt{2\pi} \kappa_e \sqrt{C_i(g + \kappa_e s^2)}} \frac{e^{-qz} \sqrt{(C_i p + g)}}{(p+\alpha)\sqrt{p-p_1}} \quad (2.52)$$

где $p_1 = -\frac{\kappa_e s^2 g}{C_i g + \kappa_e s^2}$.

Чтобы получить искомое выражение для $\hat{T}'_e(s, z, t)$ в (2.52) необходимо выполнить обратное преобразование Лапласа по t . Для удобства применения этой теоремы выражение $\hat{T}'_e(s, z, p)$ перепишем в виде

$$\hat{T}'_e(s, z, p) = \frac{\alpha r_0 S_e e^{-r_0^2 s^2/4}}{2\sqrt{2\pi} \sqrt{\kappa_e C_i (g + \kappa_e s^2)}} \hat{\theta}_1(p) \hat{\theta}_2(p),$$

где $\hat{\theta}_1(p) = \frac{1}{\sqrt{p-p_1}}$ и $\hat{\theta}_2(p) = \frac{e^{-q(p)z} \sqrt{C_i p + g}}{(p+\alpha)}$.

Обратные преобразования Лапласа функции $\hat{\theta}_1(p)$ и $\hat{\theta}_2(p)$ имеют вид [123]:

$$\theta_1(t) = L^{-1}[\hat{\theta}_1(p)] = \frac{e^{p_1 t}}{\sqrt{\pi t}}, \quad \theta_2(t) = L^{-1}[\hat{\theta}_2(p)] = e^{-q(-\alpha) \cdot z} \sqrt{g - C_i \alpha} e^{-\alpha t},$$

где $q(-\alpha) = \sqrt{s^2 + \frac{g \alpha C_i}{\kappa_e (\alpha C_i - g)}}$.

Поскольку $g \ll \alpha C_i$ то эту величину можно написать в виде $q(-\alpha) \cong \sqrt{\frac{g + \kappa_e s^2}{\kappa_e}}$.

Тогда для $T'_e(s, z, t)$ будем иметь выражение

$$T'_e(s, z, t) = \frac{\alpha r_0 S_e e^{-r_0^2 s^2/4}}{2\sqrt{2\pi} \sqrt{\kappa_e C_i (g + \kappa_e s^2)}} \int_0^t \theta_1(\tau) \theta_2(t - \tau) d\tau. \quad (2.53)$$

Выполняя обратное преобразование Ханкеля по r [119] из выражения (2.53), получим

$$T'_e(r, z, t) = \frac{\alpha r_0 S_e}{2} \sqrt{\frac{C_i(g - \alpha C_i)}{2\pi\kappa_e}} e^{-\alpha t} \times \\ \times \int_0^\infty e^{-\left(\frac{r_0^2 s^2}{4} + \sqrt{\frac{B(s)}{\kappa_e}} z\right)} \frac{\sqrt{B(s)} \cdot J_0(rs) \cdot \operatorname{erf} \left[\sqrt{\frac{\kappa_e s^2 g}{C_i B(s)} - \alpha} t \right]}{\kappa_e s^2 g - \alpha C_i(g + \kappa_e s^2)} s ds, \quad (2.54)$$

где $B(s) = g + \kappa_e s^2$.

Далее, подставляя выражение (2.52) в (2.50) для $T'_i(s, z, t)$ получим:

$$\hat{T}'_i(s, z, p) = \left(\frac{g}{C_i p + g} \right) \hat{T}'_e = \frac{\alpha r_0 S_e g e^{-r_0^2 s^2 / 4}}{2\sqrt{2\pi} C_i \sqrt{\kappa_e(g + \kappa_e s^2)}} \frac{e^{-qz}}{(p + \alpha)\sqrt{(p - p_1)(p - p_2)}}, \quad (2.55)$$

где $p_1 = -\frac{\kappa_e s^2 g}{C_i(g + \kappa_e s^2)}$, $p_2 = -g/C_i$.

Для удобства, перепишем выражение (2.55) в следующем виде

$$\hat{T}'_i(s, z, p) = \frac{b\alpha r_0 S_e g e^{-r_0^2 s^2 / 4}}{2\sqrt{2\pi} C_i \sqrt{\kappa_e(g + \kappa_e s^2)}} \hat{\theta}_3(p) \hat{\theta}_4(p),$$

где $\hat{\theta}_3(p) = \frac{1}{\sqrt{(p - p_1)(p - p_2)}}$ и $\hat{\theta}_4(p) = \frac{e^{-qz}}{p + \alpha}$.

Обратные преобразования Лапласа от этих функций имеют вид [123]:

$$\theta_3(t) = L^{-1}[\hat{\theta}_3(p)] = e^{\frac{p_1 + p_2}{2}t} I_0\left(\pm \frac{p_1 - p_2}{2}t\right) = e^{-\frac{g(B(s) + \kappa_e s^2)}{2C_i B(s)}t} I_0\left[\frac{g^2}{2C_i(g + \kappa_e s^2)}t\right], \\ \theta_4(t) = L^{-1}[\hat{\theta}_4(p)] = e^{-q(-\alpha)z} e^{-\alpha t},$$

где $I_0(x)$ – модифицированная функция Бесселя первого порядка.

Теперь опять используя теорему свертки, для $T'_i(s, z, t)$ получим выражение

$$T'_i(s, z, t) = \frac{\alpha r_0 S_e g}{2\sqrt{2\pi} C_i \sqrt{\kappa_e(g + \kappa_e s^2)}} e^{-\left(\frac{r_0^2 s^2}{4}\right)} \int_0^t \theta_3(\tau) \theta_4(t - \tau) d\tau. \quad (2.56)$$

Выполняя обратное преобразование Ханкеля по r от (2.56) будем иметь

$$T'_i(r, z, t) = \frac{\alpha r_0 S_e g}{2\sqrt{2\pi\kappa_e} C_i} e^{-\alpha t} \int_0^\infty \frac{J_0(rs)}{\sqrt{g + \kappa_e s^2}} e^{-\left(\frac{r_0^2 s^2}{4} + \sqrt{\frac{B(s)}{\kappa_e}} z\right)} \times \\ \times \left[\int_0^t e^{\left[\alpha - \frac{g(B(s) + \kappa_e s^2)}{2C_i B(s)}\right]\tau} I_0\left(\frac{g^2}{2C_i B(s)}\tau\right) d\tau \right] s ds. \quad (2.57)$$

Выражения (2.54) и (2.57) являются решением выше сформулированной задачи. Используя эти выражения, мы провели численный расчет временного и пространственного распределения температуры электронной подсистемы и решетки для металлической мишени из золота (Au), теплофизические параметры которой при $T = 300$ К приведены в таблице 2.1. Результаты расчетов приведены на рисунках 2.15-2.18.

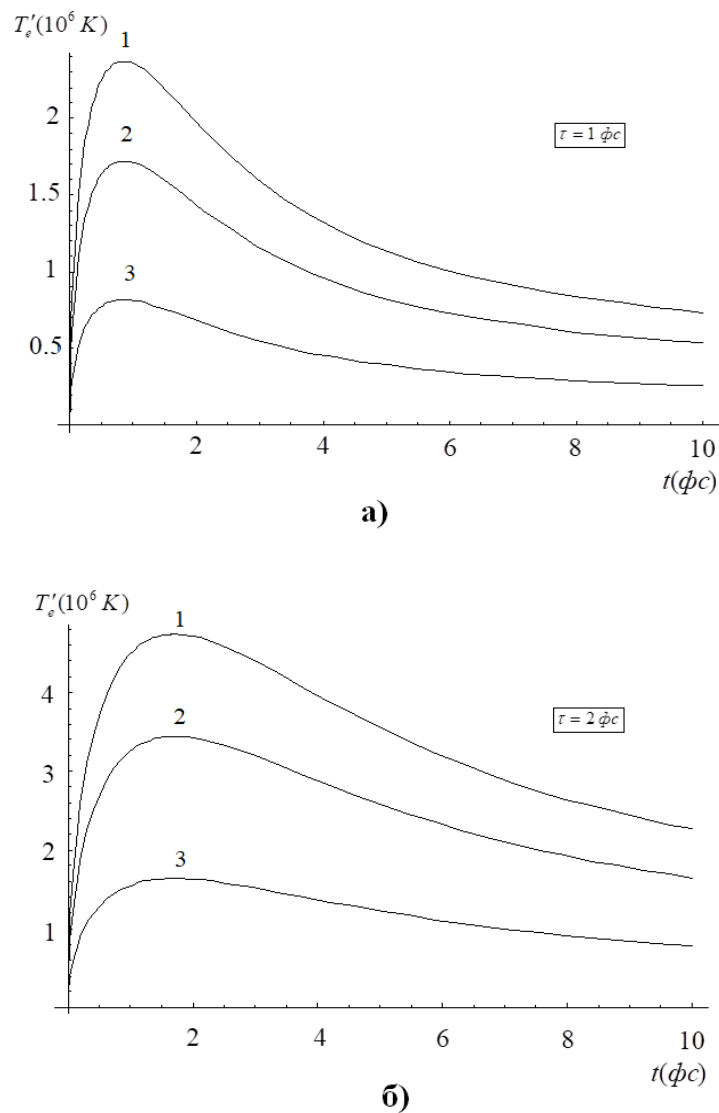


Рис. 2.15. Временная зависимость температуры T'_e – электронного газа (а-б) на поверхности мишени из золота при облучении ионами урана с начальной энергией 5 МэВ/а.е.м.: 1 – $r = 0.5$ нм, 2 – $r = 1$ нм, 3 – $r = 2$ нм при а) $t_0 = 1$ фс и б) $t_0 = 2$ фс.

Из результатов расчета следует, что во всех случаях максимальное значение температуры электронов соответствует времени $t = t_0$ (см. рис. 2.15).

Максимальное значение температуры ионов наблюдается при $t \approx C_e/g$ [31, 45], а затем резко уменьшается (см. рис. 2.16). Радиальное распределение температур обеих подсистем, иллюстрированное на рис. 2.17 соответствует гауссовой функции $D(r) = e^{-r^2/r_0^2}$ и по мере удаления от центра пучка происходит постепенное уменьшение, как T'_e так и T'_i .

Глубинное распределение обеих температур, приведенное на рис. 2.18 является экспоненциально затухающим.

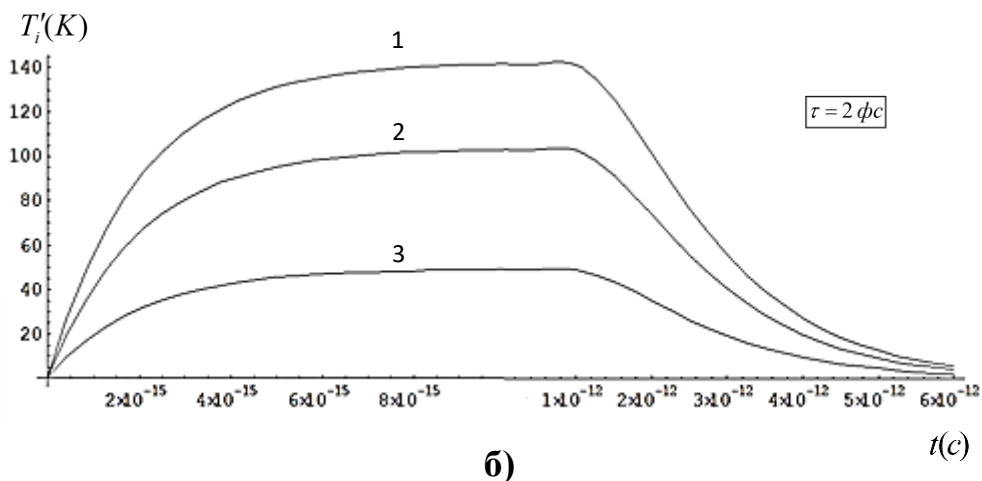
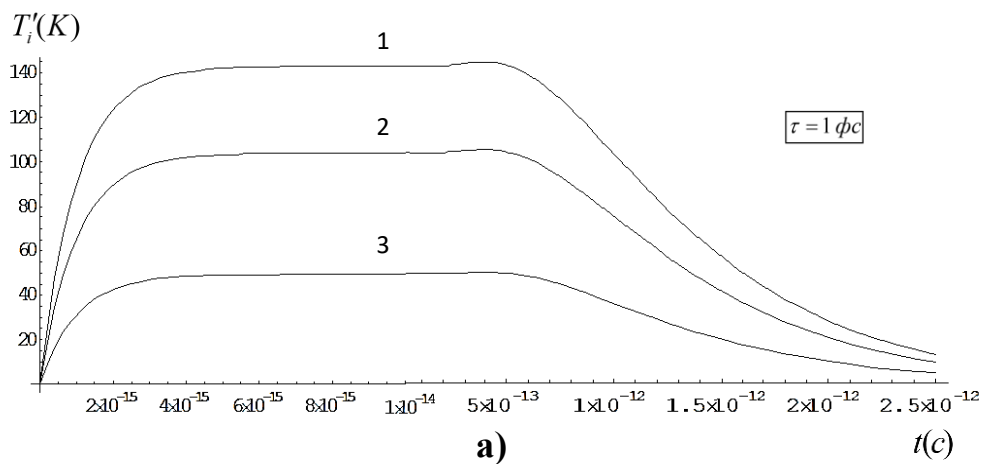


Рис. 2.16. Временная зависимость температуры решетки (T'_i) на поверхности мишени из золота при облучении ионами урана с начальной энергией 5 МэВ/а.е.м.: 1 - $r = 0.5$ нм, 2 - $r = 1$ нм, 3 - $r = 2$ нм при а) $t_0 = 1$ фс и б) $t_0 = 1$ пс.

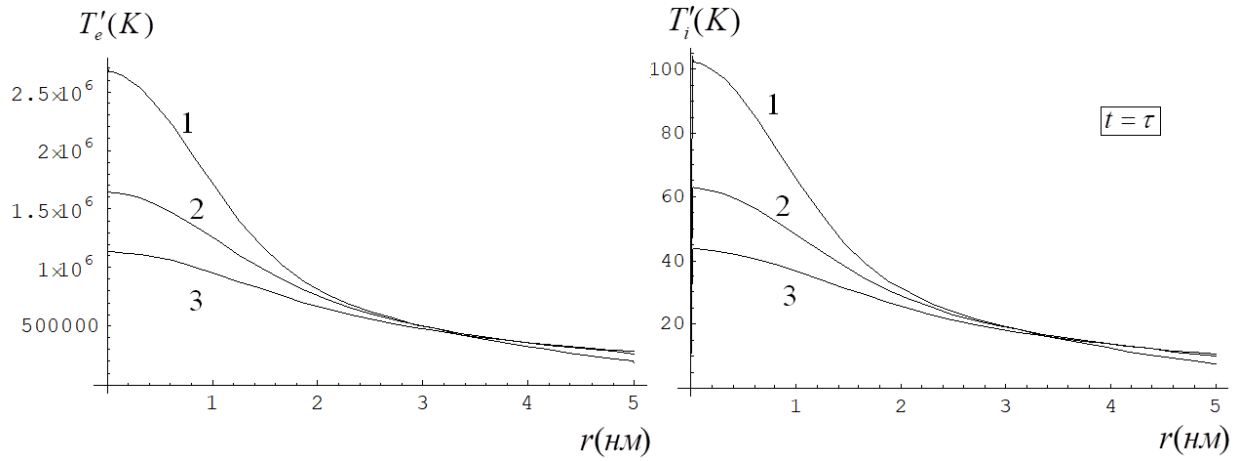


Рис. 2.17. Радиальное распределение температуры электронного газа (T'_e) и решетки (T'_i) мишени из золота при облучении ионами урана с начальной энергией 5 МэВ/а.е.м.: 1 – $z = 0$ нм, 2 – $z = 0.5$ нм, 3 – $z = 1$ нм.

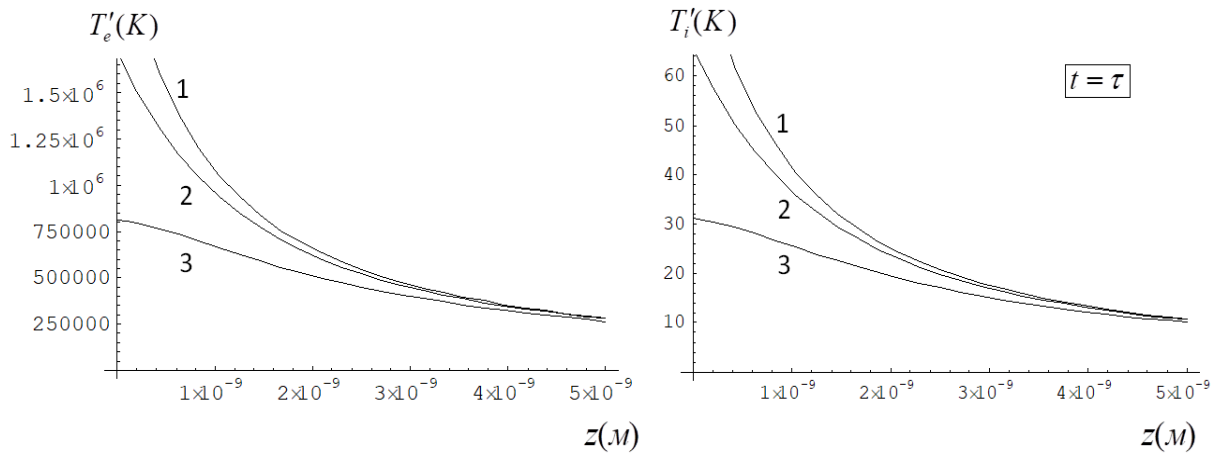


Рис. 2.18. Распределение температуры электронного газа (T'_e) и решетки (T'_i) по глубине мишени из золота при облучении ионами урана с начальной энергией 5 МэВ/а.е.м.: 1 – $r \approx 0.0001$ нм, 2 – $r = 1$ нм, 3 – $r = 2$ нм.

Таким образом, во второй главе получены аналитические выражения, описывающие пространственно-временное распределение температурных полей электронной подсистемы и кристаллической решетки металлов при воздействии импульсных потоков БТИ. В ходе исследования были рассмотрены различные формы импульса источника энергии, включая прямоугольную, гауссову и экспоненциальную зависимости. На основе полученных аналитических решений был выполнен численный расчет температурных про-

филей для металлов (Ni, Cu, Au). Результаты моделирования позволяют детально проследить динамику формирования нестационарного температурного поля в рамках двухтемпературной модели. Установлено, что характер изменения температуры существенно зависит от геометрии и временного профиля импульса БТИ. Полученные данные качественно и количественно согласуются с результатами известных численных и экспериментальных работ [22, 49].

ГЛАВА III. ОСОБЕННОСТИ ГЕНЕРАЦИИ АКУСТИЧЕСКИХ ВОЛН В МЕТАЛЛАХ ПОД ДЕЙСТВИЕМ ПУЧКА БЫСТРЫХ ТЯЖЁЛЫХ ИОНОВ

Очевидно, что при прохождении БТИ через металл передают металлу большую энергию на очень коротком пути, создавая узкую зону сильного локального нагрева. Электроны нагреваются практически мгновенно, тогда как решётка остаётся холодной, что приводит к резкому неравновесному состоянию в материале. Между тем, горячие электроны быстро передают энергию атомам решётки посредством электрон-фононного взаимодействия. Быстрый нагрев решетки вызывает тепловое расширение материала. Это приведет к быстрому росту локального давления и, как следствие, возбуждается АВ [53, 55, 57]. Исследование особенностей распространения этих волн позволяет лучше понять механизмы энергосвободения БТИ и использовать эти волны для неразрушающей диагностики материалов.

3.1. Генерация акустических волн в полубесконечных металлических образцах при воздействии ионного пучка с экспоненциальным временным и гауссовым радиальным затуханием

Процесс генерации АВ при облучении металлов БТИ инициируется передачей энергии электронной подсистеме с последующим разогревом ионной решетки через механизм электрон-фононного взаимодействия. Локальное повышение температуры решетки приводит к мгновенному термическому расширению материала в приповерхностном слое, что порождает внутреннее МН сжатия. В рамках модели полубесконечного образца ключевую роль в формировании итогового акустического сигнала играет состояние фронтальной границы ($z = 0$), контактирующей с вакуумом или воздухом. Согласно фундаментальным принципам механики сплошных сред, на такой границе должно строго соблюдаться условие свободной поверхности, требующее равенства нулю суммарного МН $\sigma(r, t)$ в любой момент времени [70].

Для компенсации возникающего термического давления и обеспечения условия $\sigma(0, t) = 0$ физическая система генерирует встречный импульс растяжения (отрицательное напряжение) равной амплитуды. Эта так называемая волна разгрузки распространяется вглубь образца со скоростью звука v_s , следуя за основным фронтом сжатия. Таким образом, итоговое напряжение в любой точке на глубине z представляет собой суперпозицию двух компонент: первичного термического расширения и пришедшей с задержкой $t = z/v_s$ волны разгрузки. Взаимодействие этих компонент трансформирует исходный униполярный сигнал в характерный биполярный АИ, вид которого определяется динамикой нагрева и упругими свойствами конкретного металла [53].

Особенностью рассматриваемой модели является отсутствие отражений от тыльной стороны образца, что соответствует реальным условиям в массивных телах, где толщина материала значительно превышает пространственную протяженность акустического пакета. В полубесконечной среде процесс формирования отраженного сигнала происходит однократно на фронтальной поверхности, после чего сформированный биполярный импульс распространяется в бесконечный объем материала, не встречая на своем пути дополнительных границ. Это позволяет детально изучить первичные механизмы трансформации энергии ионного пучка в акустический отклик без наложения вторичных эхо-сигналов.

Предположим, что цилиндрический полубесконечный образец облучается потоком ионов со известными временными и радиальными распределениями. Тогда исходные уравнения термоупругости в рамках МТП в цилиндрической системе координат, с учётом аксиальной симметрии имеет следующий вид [53, 70, 74]:

$$C_e \frac{\partial T_e}{\partial t} = \kappa_e \nabla^2 T_e - g(T_e - T_i) + A_e(r, t), \quad (3.1)$$

$$C_i \frac{\partial T_i}{\partial t} = g(T_e - T_i), \quad (3.2)$$

$$\nabla^2 \sigma - \frac{1}{v_s^2} \frac{\partial^2 \sigma}{\partial t^2} = -\frac{\beta_V}{K v_s^2} \frac{\partial^2 T_i}{\partial t^2}. \quad (3.3)$$

Для рассматриваемого случай величину A_e представим в виде наиболее часто используемого выражения (2.2) [103, 104]: $A_e(r, t) = bS_e e^{-\alpha t} e^{-r^2/r_0^2}$, где b – нормировочная константа, S_e – профиль ионизационных потерь иона, $\alpha = 1/t_0$, v_s – скорость звука в среде, K – модуль изотермического сжатия, β_V – коэффициент объёмного теплового расширения.

Очевидно, что для решения уравнение (3.3) необходимо иметь явное выражение для нестационарной поле температуры решетки $\hat{T}'_i(s, p)$. Этот выражение, нам получен в разделе 2.2 при начальных и граничных условиях (2.14), и мы здесь их не приводим.

Начальные и граничные условия для $\sigma(r, z, t)$ имеют следующий вид [109, 121]:

$$\sigma(r, z, 0) = 0, \quad \left. \frac{\partial \sigma(r, z, t)}{\partial t} \right|_{t=0} = 0, \quad \sigma(r, z, t)|_{z=0} = 0 \quad (3.4)$$

Применяя преобразования Ханкеля по r и Лапласа по t к уравнению (3.3) и принимая во внимание начальное и граничные условия (3.4), будем иметь

$$\frac{d^2 \hat{\sigma}(s, z, p)}{dz^2} - q'^2 \hat{\sigma}(s, z, p) = -\gamma q'^2 \hat{T}'_i(s, p), \quad (3.5)$$

где $q' = p/v_s$, $\gamma = \beta_V/K$. Решение уравнения (3.5) представим в виде

$$\hat{\sigma}(z) = A e^{q'z} + B e^{-q'z}. \quad (3.6)$$

где A и B – постоянные интегрирования. Подставляя (3.6) в (3.5), будем иметь

$$\hat{\sigma}(z) = A e^{q'z} + B e^{-q'z} + \gamma \hat{T}'_i. \quad (3.7)$$

Из граничных условия (3.4) следует равенства

$$\hat{\sigma}(0) = A + B + \gamma \hat{T}'_i = 0.$$

Также для ограниченности решения при $z \rightarrow \infty$, коэффициент при растущей экспоненте должен быть равен нулю: $A = 0$. Тогда $B = -\gamma \hat{T}'_i$.

Подставляя $\hat{T}'_i(s, p)$, приведённая в (2.18), в (3.7) и с учетом $q' = p/v_s$, получим

$$\hat{\sigma}(s, z, p) = \frac{b\gamma S_e g}{2C_e C_i} \tilde{D}(s) \hat{\theta}(p) \left(1 - e^{-\frac{z}{v_s} p}\right) \quad (3.8)$$

где

$$\begin{aligned} \hat{\theta}_1(p) &= \frac{1}{(p + \alpha)(p - p_1)(p - p_2)}, \\ p_{1,2} &= \frac{-\left(\kappa_e s^2 + g + \frac{gC_e}{C_i}\right) \pm \sqrt{\left(\kappa_e s^2 + g + \frac{gC_e}{C_i}\right)^2 - 4C_e \left(\frac{g\kappa_e s^2}{C_i}\right)}}{2C_e}. \end{aligned} \quad (3.9)$$

Теперь найдем обратное преобразование Лапласа по p . Уравнение для $\hat{\sigma}(s, z, p)$ состоит из двух частей, статическая часть $\hat{\theta}_1(p)$ и запаздывающая $\hat{\theta}_1(p) \cdot e^{-\frac{z}{v_s}p}$. Используя стандартное преобразование $\mathcal{L}^{-1}\left(\frac{1}{p-p_0}\right) = e^{p_0 t}$ для $\theta(t)$ получим выражение

$$\theta_1(t) = \frac{e^{-\alpha t}}{(-\alpha - p_1)(-\alpha - p_2)} + \frac{e^{p_1 t}}{(p_1 + \alpha)(p_1 - p_2)} + \frac{e^{p_2 t}}{(p_2 + \alpha)(p_2 - p_1)}. \quad (3.10)$$

Умножение на e^{-ap} в пространстве Лапласа соответствует сдвигу во времени (запаздыванию):

$$\mathcal{L}^{-1}\{e^{-c p} \hat{\theta}(p)\} = \theta_1(t - c) \cdot U(t - c)$$

где $U(t)$ – функция Хевисайда, а $c = z/v_s$ – время прохождения акустической волны до точки z . Используя свойство запаздывания, получим

$$\sigma(s, z, t) = \frac{bS_e g \gamma}{2C_e C_i} \tilde{D}(s) \cdot \left[\theta_1(t) - \theta_1\left(t - \frac{z}{v_s}\right) U\left(t - \frac{z}{v_s}\right) \right]. \quad (3.11)$$

После применения обратное преобразование Ханкеля от выражение (3.11) получим

$$\sigma(r, z, t) = \frac{bS_e g \beta_V r_0^2}{4C_e C_i K} \int_0^\infty e^{-r_0^2 s^2 / 4} J_0(sr) \left[\theta_1(t) - \theta_1\left(t - \frac{z}{v_s}\right) U\left(t - \frac{z}{v_s}\right) \right] s ds, \quad (3.12)$$

где выражение $\theta_1(s, z, t)$ представлено в (3.10).

Выражение (3.12) является решением выше сформулированной задачи. Используя этот выражение, мы провели численный расчет временного и пространственного распределения акустического сигнала в металлических образцов из золота (Au) и меди (Cu), теплофизические параметры которых при $T=300$ K приведены в таблицах 2.1 и 3.1. [120]. Результаты численного расчета иллюстрированы на рисунках 3.1 - 3.3.

Таблица 3.1. Теплофизические параметры металлов, используемые в численных расчетах.

Метал	K [$\times 10^{-12} \text{ М} \cdot \text{с}^2 \cdot \text{К} \cdot \text{с}^{-1}$]	β_V [$\times 10^{-6} \text{ К}^{-1}$]	v_s [$\times 10^3 \text{ М} \cdot \text{с}^{-1}$]
Медь (Cu)	7.30	50.1	4.70
Золото (Au)	5.77	42.6	3.24

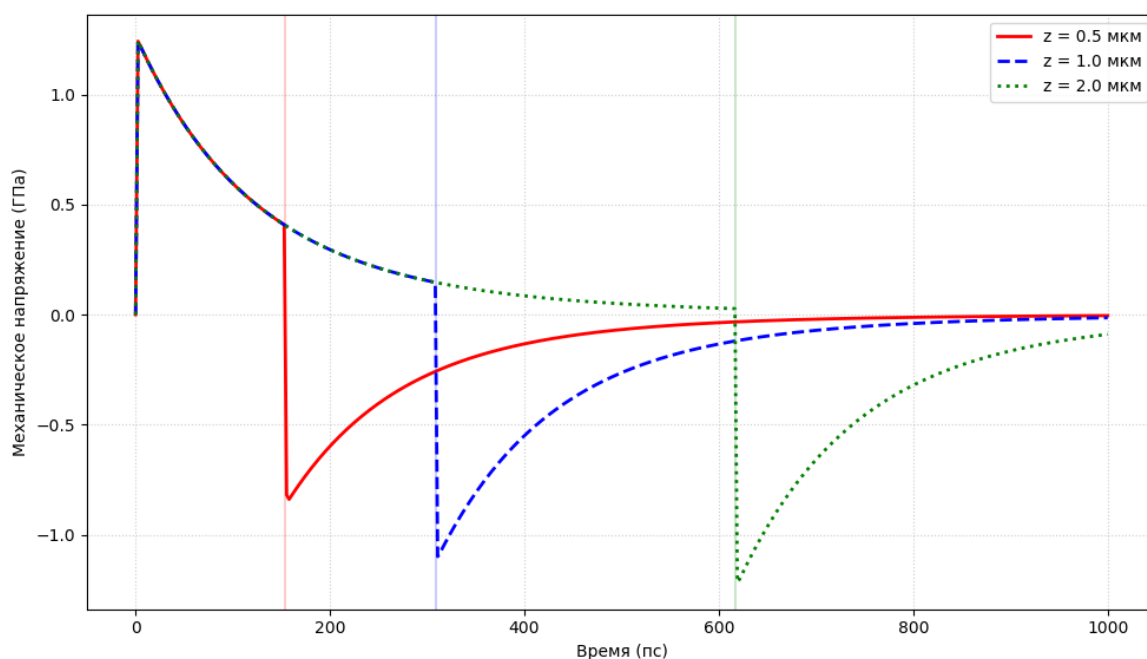


Рис. 3.1. Динамика формирования АИ в золоте (Au) на глубинах 0.5 мкм (сплошная линия), 1.0 мкм (пунктирная) и 2.0 мкм (точечная).

На рис. 3.1 продемонстрировано формирование биполярного АИ, где анализ расчетных зависимостей для золота на глубинах 0.5, 1.0 и 2.0 мкм выявляет характерную трансформацию термоупругого отклика, обусловленную конечной скоростью распространения акустического сигнала $v_s = 3.24 \times 10^3$ м/с. Начальная фаза сжатия, вызванная быстрым разогревом ионной решетки, сменяется резкой инверсией знака напряжения при достижении моментов времени $t = z/v_s$, что строго соответствует приходу волны разгрузки от свободной поверхности образца. На представленных графиках прослеживается линейное смещение точек перехода $\sigma = 0$ в область больших времен при увеличении глубины наблюдения, подтверждая физическую модель формирования биполярного импульса как суперпозиции локального расширения и отраженного сигнала. На данных микронных масштабах начальная пиковая амплитуда сжатия практически идентична для всех глубин; однако с увеличением расстояния от поверхности наблюдается закономерное нарастание пиковой амплитуды растяжения, отражающее динамику постепенной релаксации напряжений ко времени прихода акустического фронта.

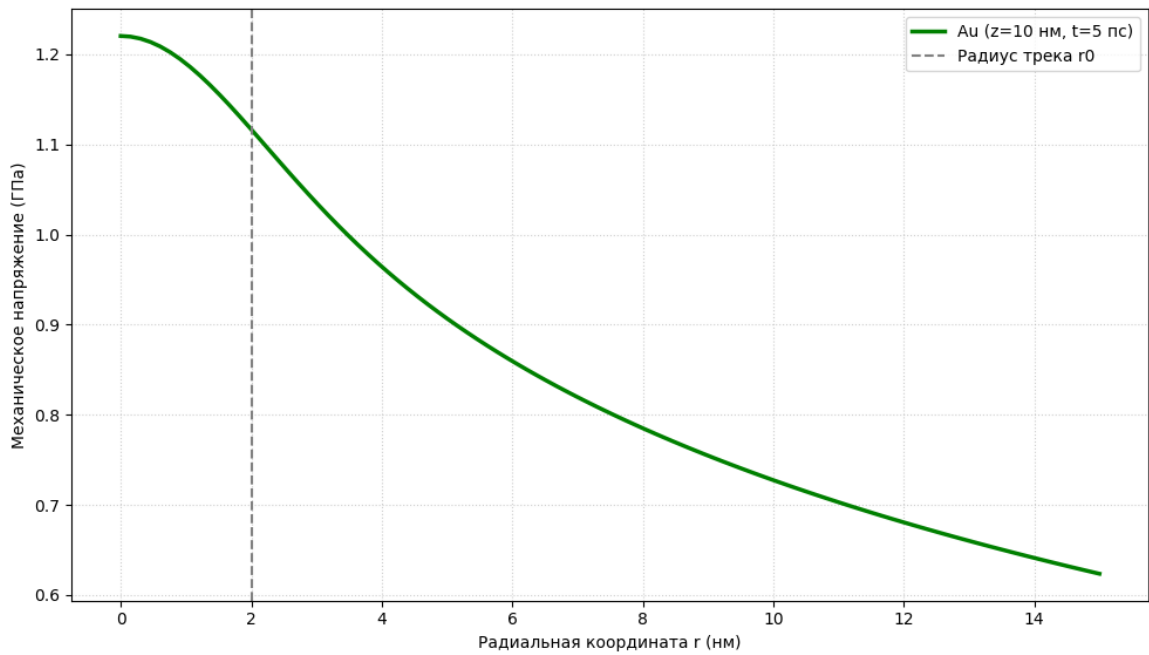


Рис. 3.2. Радиальное распределение МН полубесконечной мишени Au при облучении ионами урана с начальной энергией 5 МэВ/а.е.м. в момент времени $t = 5$ пс, $z = 20$ нм.

Как показано на рис. 3.2, радиальное распределение МН полубесконечной мишени Au (на глубине $z = 20$ нм) хорошо согласуется с исходным гауссовым профилем ионного пучка. На момент времени $t = 5$ пс, акустический отклик полностью наследует симметрию источника, сохраняя максимум на оси трека ($r = 0$) и характерное затухание на периферии. Таким образом, пространственная структура акустического поля в приповерхностном слое служит прямым отображением радиальной структуры ионного трека r_0 , что подтверждается сохранением формы функции Бесселя в интегральном решении.

На рис. 3.3 показано пространственное распределение механического напряжения (МН) в полубесконечной мишени Au на момент времени 100 пс. Данный график наглядно демонстрирует динамику распространения акустического отклика в условиях пространственно-однородного источника энерговыделения.

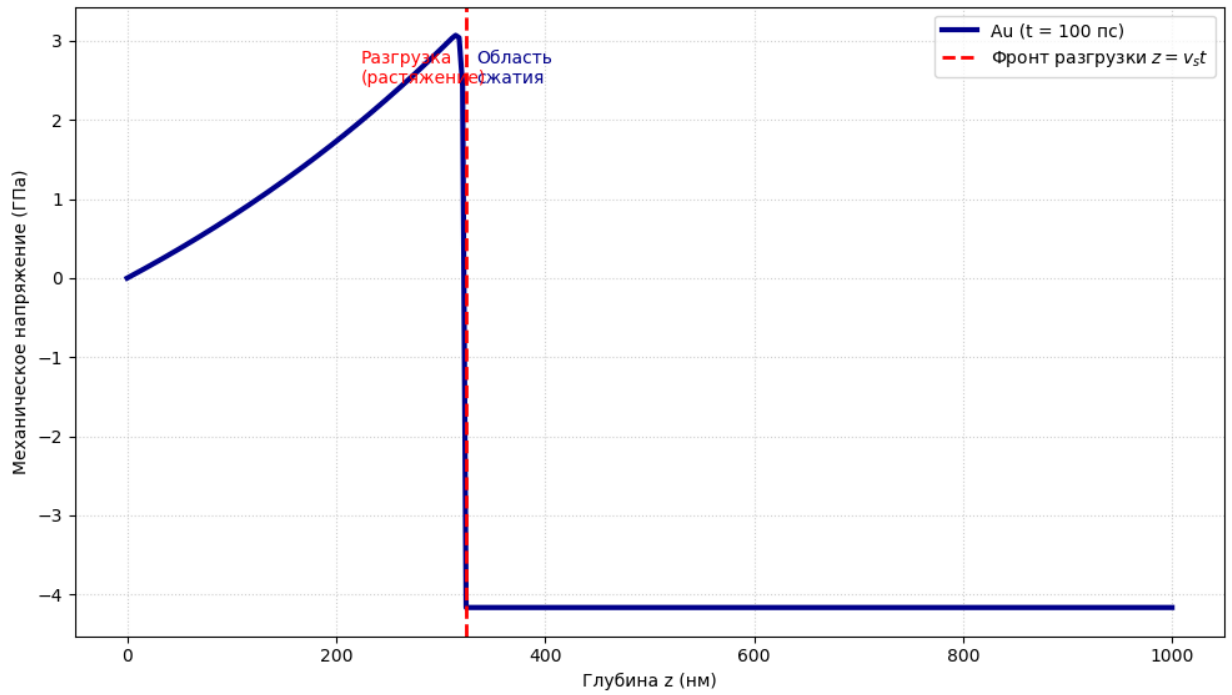


Рис. 3.3. Распределение МН по глубине полубесконечной мишени Au при облучении ионами урана с начальной энергией 5 МэВ/а.е.м. в момент времени $t = 100$ пс.

Постоянство амплитуды напряжения ($\sigma \approx -4.10$ ГПа) на глубинах $z > 324$ нм подтверждает, что функция источника $A_e(r, t)$ в данной модели не зависит от координаты z , создавая равномерное поле сжатия в объемах, еще не затронутых волновыми процессами. Формирование биполярного профиля происходит исключительно за счет интерференции этого статического вклада с бегущей волной разгрузки, стартующей от свободной поверхности $z = 0$ в момент $t = 0$. Четкая граница в точке $z \approx 324$ нм отмечает положение акустического фронта, определяемое соотношением $z = v_s t$ при скорости звука в золоте $v_s = 3.24 \times 10^3$ м/с. Линейный спад напряжения от фронта к поверхности и строгое выполнение граничного условия $\sigma(0, t) = 0$ свидетельствуют о том, что акустический пакет на данном этапе представляет собой суперпозицию однородного расширения решетки и отраженного импульса компенсации, который «снимает» напряжение по мере своего продвижения вглубь материала.

Таким образом, в данном разделе на основе аналитического решения уравнений термоупругости с использованием преобразований Лапласа и Ханкеля была построена теоретическая модель генерации АВ в полубесконечных металлических средах при воздействии БТИ. Установлено, что ключевым механизмом формирования акустического отклика является суперпозиция мгновенного термического расширения решетки и волны разгрузки, возникающей на свободной поверхности образца для компенсации внутреннего давления. Проведенные численные расчеты для меди и золота подтвердили, что итоговый акустический сигнал обладает характерным биполярным профилем, временные и пространственные параметры которого определяются скоростью звука в материале и константой электрон-фононной связи. Показано, что на малых временных интервалах радиальное распределение МН строго соответствует гауссовому профилю ионного трека, а пространственная структура импульса в глубине материала наглядно демонстрирует движение фронта разгрузки, разделяющего зоны сжатия и растяжения. Отсутствие зависимости функции источника от координаты z в рамках данной модели позволило изолировать эффекты граничных условий и подтвердить линейный характер распространения сформированного акустического пакета в бесконечный объем мишени.

3.2. Генерация акустических волн в металлических пластинках при воздействии ионного пучка с экспоненциальным временным и гауссовым радиальным затуханием

Очевидно, что для рассматриваемого случай исходные уравнения термоупругости имеют тот же вид (3.1.)-(3.3) и существенно отличается лишь граничное условия $\sigma(r, z, t)|_{z=0,L} = 0$.

Выполняя интегральные преобразования Лапласа по t и Ханкеля по r в уравнении (3.3) получим

$$\frac{d^2 \hat{\sigma}(s, z, p)}{dz^2} - q'^2 \hat{\sigma}(s, z, p) = -\gamma q'^2 \hat{T}_i'(s, p), \quad (3.13)$$

где $q' = p/v_s$, $\gamma = \beta_v/K$. Решение уравнение (3.13), полученное методом вариации постоянных имеет следующий вид

$$\hat{\sigma}(z) = Ae^{q'z} + Be^{-q'z} + \gamma\hat{T}_i'(s, p). \quad (3.14)$$

Для определения константы интегрирования из граничных условия следует равенства

$$\hat{\sigma}(0) = A + B + \gamma\hat{T}_i = 0, \quad \hat{\sigma}(L) = Ae^{q'L} + Be^{-q'L} + \gamma\hat{T}_i = 0.$$

Из первого условия определим константы $B = -\gamma\hat{T}_i - A$. Подставляя во второе, получим

$$A = \gamma\hat{T}_i \frac{e^{-q'L} - 1}{2\sinh(q'L)}, \quad B = -\gamma\hat{T}_i \frac{e^{q'L} - 1}{2\sinh(q'L)}.$$

Подставляя эти выражения в (3.14), будем иметь

$$\hat{\sigma}(s, p, z) = \frac{bg\gamma}{2C_e C_i} \tilde{D}(s) \hat{f}(p) \frac{1}{(p - p_1)(p - p_2)} \left[1 - \frac{\sinh[q'(L - z)] + \sinh(q'z)}{\sinh(q'L)} \right], \quad (3.15)$$

$$\text{где } p_{1,2} = \frac{-\left(\kappa_e s^2 + g + \frac{gC_e}{C_i}\right) \pm \sqrt{\left(\kappa_e s^2 + g + \frac{gC_e}{C_i}\right)^2 - 4C_e \left(\frac{g\kappa_e s^2}{C_i}\right)}}{2C_e}.$$

Необходимо выполнять обратное преобразование Лапласа от (3.15).

Используя обозначение

$$\theta_1(p) = \frac{1}{(p + \alpha)(p - p_1)(p - p_2)}, \quad \theta_2(p) = \left(\frac{\sinh[p(L - z)/v_s] + \sinh(pz/v_s)}{\sinh(pL/v_s)} \right),$$

перепишем выражение (3.15) в следующем виде:

$$\hat{\sigma}(s, z, p) = \frac{bg\gamma}{2C_e C_i} \tilde{D}(s) \cdot \theta_1(p) \cdot [1 - \theta_2(p)].$$

Согласно теореме о свёртке, обратное преобразование Лапласа равно:

$$\sigma(s, z, t) = \frac{bg\gamma}{2C_e C_i} \tilde{D}(s) \left[\theta_1(t) - \int_0^t \theta_1(\tau) \theta_2(t - \tau) d\tau \right], \quad (3.16)$$

где $\theta_1(t) = \mathcal{L}^{-1}\{\theta_1(p)\}$, $\theta_2(t) = \mathcal{L}^{-1}\{\theta_2(p)\}$.

Очевидно, что необходимо найти $\theta_1(t)$ и $\theta_2(t)$ по отдельности. Используя стандартное преобразование $\mathcal{L}^{-1}\left\{\frac{1}{p - p_0}\right\} = e^{p_0 t}$ для $\theta_1(t)$ получим выражение:

$$\theta_1(z, t) = \frac{e^{-\alpha t}}{(-\alpha - p_1)(-\alpha - p_2)} + \frac{e^{p_1 t}}{(p_1 + \alpha)(p_1 - p_2)} + \frac{e^{p_2 t}}{(p_2 + \alpha)(p_2 - p_1)}. \quad (3.17)$$

Чтобы найти обратное преобразование Лапласа, сначала выразим $\theta_2(p)$ через экспоненты (принимая во внимание, что $\sinh(x) = \frac{e^x - e^{-x}}{2}$) и умножим числитель и знаменатель на $e^{-q'L}$:

$$\begin{aligned}\theta_2(p) &= \frac{e^{q'z} - e^{-q'z} + e^{q'(L-z)} - e^{-q'(L-z)}}{e^{q'L}(1 - e^{-2q'L})} = \\ &= \frac{e^{-p(L-z)/v_s} - e^{-p(L+z)/v_s} + e^{-pz/v_s} - e^{-p(2L-z)/v_s}}{1 - e^{-2pL/v_s}}.\end{aligned}$$

Используя разложение в геометрический ряд $\frac{1}{1-x} = \sum_{n=0}^{\infty} x^n$, где $x = e^{-2pL/v_s}$, получим

$$\theta_2(p) = \sum_{n=0}^{\infty} [e^{-p\tau_{1,n}} - e^{-p\tau_{2,n}} + e^{-p\tau_{3,n}} - e^{-p\tau_{4,n}}],$$

где

$$\tau_{1,n} = \frac{(2n+1)L - z}{v_s}, \quad \tau_{2,n} = \frac{(2n+1)L + z}{v_s}, \quad \tau_{3,n} = \frac{2nL + z}{v_s}, \quad \tau_{4,n} = \frac{(2n+2)L - z}{v_s}.$$

Далее мы применяем обратное преобразование Лапласа $\mathcal{L}^{-1}$ к каждому члену ряда по отдельности. Применяя свойство «смещение во времени»

$$\mathcal{L}^{-1}\{e^{-pT}\} = \delta(t - T),$$

где $\delta(t)$ — это дельта-функция Дирака (единичный импульс в $t = T$), к выше полученному нами ряду, будем иметь:

$$\theta_2(z, t) = \sum_{n=0}^{\infty} [\delta(t - \tau_{1,n}) - \delta(t - \tau_{2,n}) + \delta(t - \tau_{3,n}) - \delta(t - \tau_{4,n})]. \quad (3.18)$$

После применения обратное преобразование Ханкеля от выражении (3.16) получим

$$\sigma(r, z, t) = \frac{bg\beta_V r_0^2}{4C_e C_i K} \int_0^{\infty} e^{-r_{+0}^2 s^2 / 4} J_0(sr) \left[\theta_1(t) - \int_0^t \theta_1(\tau) \theta_2(t - \tau) d\tau \right] s ds, \quad (3.19)$$

где функции $\theta_1(z, t)$ и $\theta_2(z, t)$ представлены в (3.17) и (3.18).

Выражение (3.19) является решением выше сформулированной задачи. Используя это выражение мы провели численный расчет временного и пространственного распределения акустического сигнала в пластинках из золота (Au) и меди (Cu) (с толщиной $L = 10$ мкм), теплофизические параметры кото-

рых при $T = 300$ К приведены в таблицах 2.1 и 3.1. Результаты численного расчета иллюстрированы на рисунках 3.4 - 3.7.

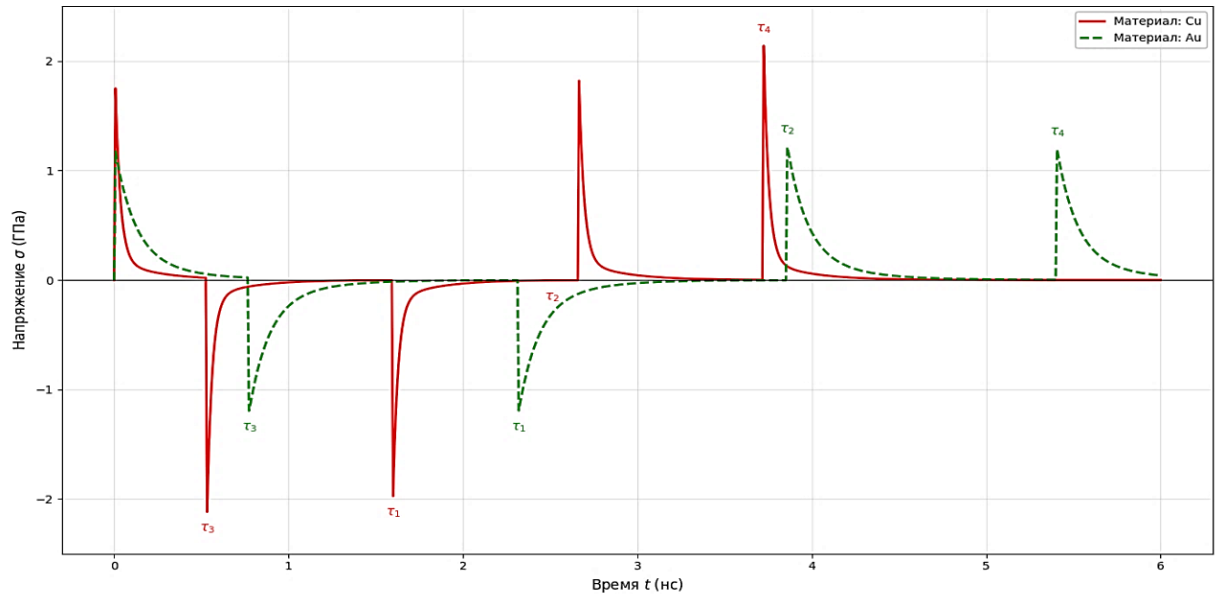


Рис. 3.4. Сравнение временной эволюции МН $\sigma(t)$ в меди (Cu, сплошная линия) и золоте (Au, пунктирная линия) на глубине $z = L/4$ при $r_0 = 2$ нм.

На рис. 3.4 показана пространственно-временная эволюцию термоупругого отклика в медной мишени (Cu) при воздействии БТИ в рамках МТП. На основе представленных результатов численного моделирования, сравнительный анализ временной эволюции ТУН $\sigma(t)$ для меди (Cu) и золота (Au) при $z = L/4$ выявляет существенные различия в динамике акустического отклика, обусловленные их теплофизическими свойствами.

Для меди характерна более высокая амплитуда начального сжатия и более интенсивная релаксация электронной температуры, что связано с аномально высоким коэффициентом электрон-фононной связи $g = 12.7 \times 10^{16}$ Вт/(м³·К), превышающим аналогичный показатель для золота более чем в пять раз. Акустические пики τ_n в золоте смещены в сторону больших времен относительно меди, что находит прямое подтверждение в различии скоростей звука материалов: для Au этот параметр составляет ≈ 3240 м/с, в то время как для Cu он достигает ≈ 4700 м/с. В обоих материалах наблюдается

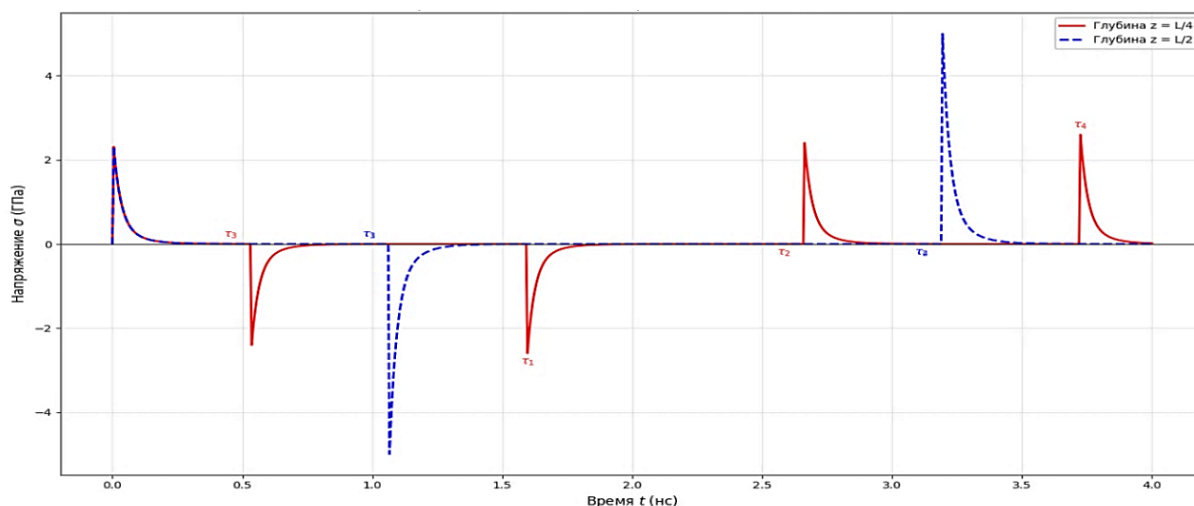


Рис. 3.5. Временная зависимость ТУН в золотой пластинке при облучении ионами урана с начальной энергией 5 МэВ/а.е.м. при $z=L/4$, $z=L/2$.

инверсия фазы напряжения при отражении первичных импульсов от свободных границ пластины, однако более быстрое затухание температурного пика в меди приводит к формированию более узких и четко выраженных волновых фронтов по сравнению с золотом.

Как следует из рис. 3.5, на начальном этапе ($t \approx 0.22$ пс) наблюдается формирование профиля напряжений сжатия амплитудой около 2.1 ГПа. Данное явление обусловлено сверхбыстрой передачей энергии от электронной подсистемы кристаллической решетке металла. Анализ временных зависимостей $\sigma(t)$ выявляет сложную динамику интерференции АИ: в точке $z = L/4$ фиксируется последовательный приход первичных фронтов τ_3 (от передней поверхности) и τ_1 (от задней поверхности), тогда как в центре пластины ($z = L/2$) наблюдается их одновременная встреча ($t \approx 1.06$ нс), приводящая к возникновению пикового напряжения сжатия порядка -5 ГПа вследствие конструктивной суперпозиции. Последующая инверсия фазы и появление пиков растяжения (τ_2, τ_4) подтверждают процесс многократных переотражений акустической энергии от свободных границ образца.

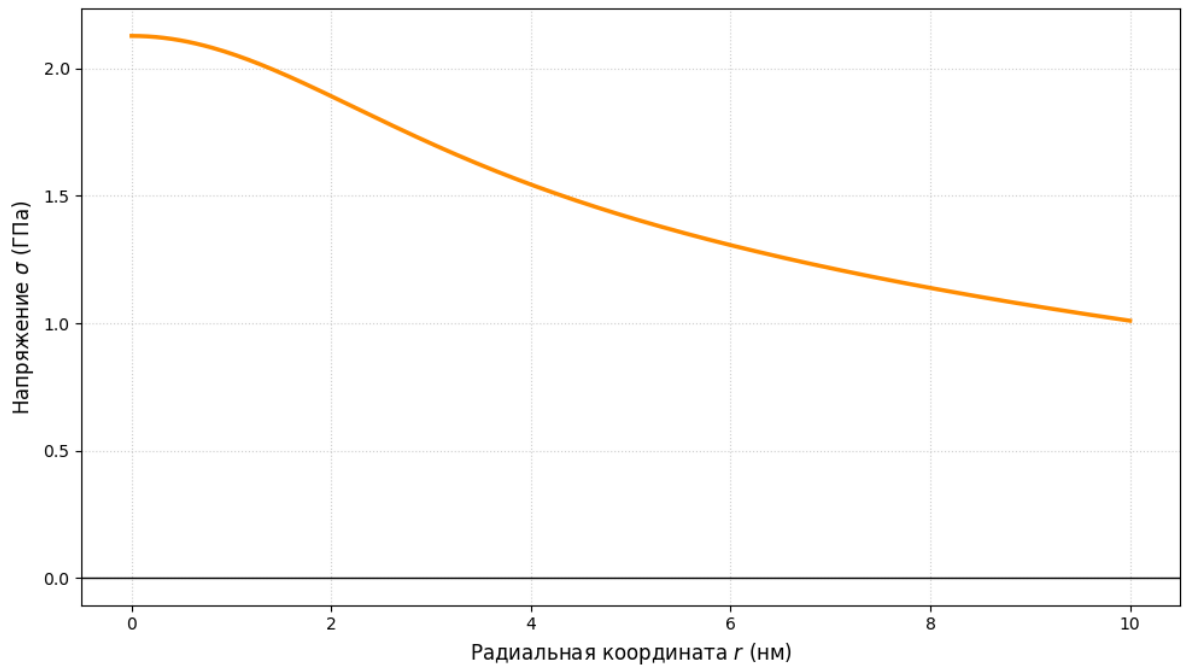


Рис. 3.6. Радиальное распределение ТУН пластинки из золота при облучении ионами урана с начальной энергией 5 МэВ/а.е.м., $z = L/2$.

На рис. 3.6 показана радиальное распределение ТУН $\sigma(r)$ в медной мишени (Cu) в момент времени $t = C_e/g \approx 0.223$ пс, соответствующий завершению этапа интенсивного энергообмена между электронной и ионной подсистемами. Характер кривой на графике демонстрирует прямую корреляцию с экспоненциально затухающим профилем источника энергии ионного трека $A_e(r, t) = be^{-\alpha t}e^{-r^2/r_0^2}$. Максимальное значение напряжения сжатия (около 2.1 ГПа) наблюдается непосредственно на оси пролета иона ($r = 0$), где плотность ионизационных потерь максимальна. Плавное снижение амплитуды при удалении от центра трека до значения порядка 1 ГПа на расстоянии 10 нм отражает пространственную локализацию теплового пика и начальную стадию формирования АВ.

На рис. 3.7 представлены результаты численного моделирования, описывающие пространственно-временную эволюцию ТУН в медной мишени (Cu) при воздействии БТИ. В рамках используемой модели функция энерговыделения иона $A_e(r, t)$ не зависит от координаты z , что физически соответ

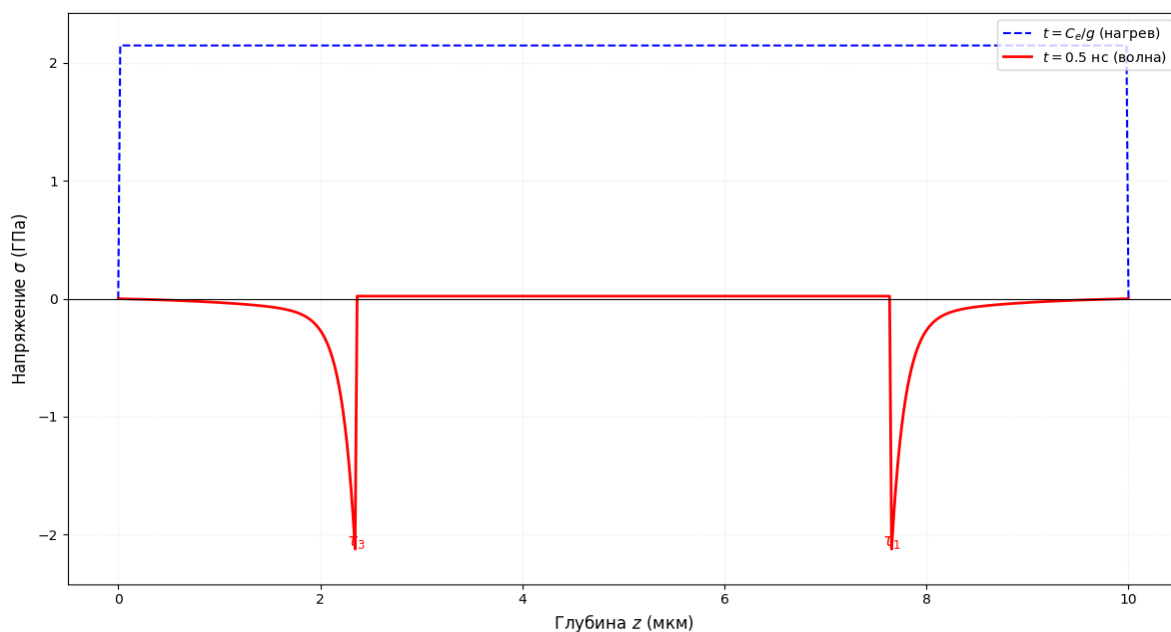


Рис. 3.7. Распределение ТУН по глубине пластинки из золото при облучении ионами урана с начальной энергией 5 МэВ/а.е.м. в моменты времени $t = C_e/g$ и $t = 0.5$ нс.

ствуется случаю равномерной ионизации вдоль всей траектории пробега частицы в тонкой пластине. На начальном этапе ($t = C_e/g \approx 0.22$ пс) это приводит к формированию однородного по глубине профиля напряжений сжатия амплитудой около 2.1 ГПа. Радиальное распределение $\sigma(r)$ в этот момент повторяет экспоненциальную форму источника, достигая максимума на оси трека ($r = 0$) и плавно затухая к периферии. С течением времени ($t = 0.5 - 1.0$ нс) за счет наличия свободных границ мишени начальное возбуждение трансформируется в систему встречных АИ τ_3 и τ_1 , при этом в геометрическом центре пластины ($z = L/2$) наблюдается эффект конструктивной интерференции, приводящий к практически двукратному увеличению пикового напряжения (до -5 ГПа).

Таким образом, в данном разделе на основе МТП исследована динамика генерации АВ в металлах при облучении БТИ. Установлено, что сверхбыстрый разогрев ионной решетки приводит к формированию начальных напряжений сжатия порядка нескольких ГПа, амплитуда которых определяется интенсивностью электрон-фононного взаимодействия. Эволюция систе-

мы характеризуется распространением встречных АИ от свободных поверхностей пластины, интерференция которых в центре образца вызывает значительный рост пикового давления. Сравнительный анализ подтвердил, что теплофизические параметры материала, такие как скорость звука и коэффициент связи g , критически влияют на временные интервалы прихода волновых фронтов и их амплитуду. Полученные результаты важны для оценки радиационной стойкости материалов и понимания механизмов их структурных изменений под воздействием ионного облучения.

3.3. Генерация акустических волн в полубесконечных металлических образцах с учетом затухания электронных потерь по глубине (аппроксимация Лямшева)

В предыдущих разделах было показано, что сверхбыстрый локальный нагрев металлической мишени БТИ инициирует интенсивное термоупругое расширение, которое выступает первопричиной и основным источником АВ. Однако для полубесконечных образцов профиль энерговыведения не является однородным вдоль траектории иона. Как было обосновано в первой главе, точное описание тепловых и механических процессов требует учета затухания ионизационных потерь по мере проникновения частицы вглубь материала. В данном разделе применяется аппроксимация Лямшева [57] для пространственного распределения источников тепла, что позволяет аналитически исследовать влияние продольного градиента температуры на эволюцию ТУН.

Исходным пунктом для определения акустического отклика служит волновое уравнение термоупругости, записанное относительно МН δ . Применяя интегральные преобразования Лапласа по времени t и Ханкеля нулевого порядка по радиальной координате r , как это было продемонстрировано ранее, получаем следующее обыкновенное дифференциальное уравнение второго порядка относительно координаты z :

$$\frac{d^2 \hat{\sigma}(s, z, p)}{dz^2} - q'^2 \hat{\sigma}(s, z, p) = -\gamma q'^2 \hat{T}'_l(s, z, p), \quad (3.20)$$

где $q' = p/v_s$, v_s – скорость продольной звуковой волны в среде, $\gamma = \beta_V/K$, β_V – коэффициент объемного теплового расширения, K – модуль изотермического сжатия, а $\hat{T}'_l(s, z, p)$ – температура решетки.

В качестве источника механических возмущений выступает градиент ТП кристаллической решетки, $\hat{T}'_l$ [1, 3], которое было аналитически найдено в разделе 2.4 с учетом аппроксимации Лямшева. Подставляя известное выражение (2.41) в правую часть уравнения (3.20), получим неоднородное дифференциальное уравнение второго порядка:

$$\frac{d^2 \tilde{\sigma}}{dz^2} - q'^2 \tilde{\sigma} = \frac{\gamma q'^2 g Q_0 \tilde{f}(p) \bar{\Phi}(s)}{(C_i p + g) C_e (p - p_1)} \left[e^{-\mu_0 z} - \frac{\mu_0}{\sqrt{\frac{C_e}{k_e}} \sqrt{p - p_2}} e^{-z \sqrt{\frac{C_e}{k_e}} \sqrt{p - p_2}} \right]. \quad (3.21)$$

Для упрощения математических выкладок введем обозначения

$$W(p, s) = \frac{\gamma q'^2 g Q_0 \tilde{f}(p) \bar{\Phi}(s)}{(C_i p + g) C_e (p - p_1)}, \quad k_d = \sqrt{\frac{C_e}{k_e}} \sqrt{p - p_2}$$

и уравнение (3.21) принимает следующий более компактный вид:

$$\frac{d^2 \tilde{\sigma}}{dz^2} - q'^2 \tilde{\sigma} = W(p, s) e^{-\mu_0 z} - W(p, s) \frac{\mu_0}{k_d} e^{-k_d z}. \quad (3.22)$$

Решение данного уравнения будем искать в виде суперпозиции общего решения однородного уравнения и двух частных решений, соответствующих каждому источнику в правой части:

$$\tilde{\sigma}(p, s, z) = \tilde{\sigma}_{\text{одн}} + \tilde{\sigma}_1 + \tilde{\sigma}_2 \quad (3.23)$$

Общее решение однородного уравнения записываем через экспоненты:

$$\tilde{\sigma}_{\text{одн}} = A e^{q' z} + B e^{-q' z}$$

Поскольку рассматривается полубесконечная мишень ($z \geq 0$), МН должны затухать при $z \rightarrow \infty$. Из условия ограниченности решения следует, что коэффициент при положительной экспоненте равен нулю ($A = 0$).

Для нахождения первого частного решения $\tilde{\sigma}_1$, соответствующего объемному поглощению энергии по Лямшеву, используем форму $C_1 e^{-\mu_0 z}$. Подставляя ее в левую часть уравнения (3.23), получим:

$$C_1(\mu_0^2 - q'^2)e^{-\mu_0 z} = W(p, s)e^{-\mu_0 z} \Rightarrow C_1 = \frac{W(p, s)}{\mu_0^2 - q'^2}$$

Второе частное решение $\widetilde{\sigma}_2$, обусловленное диффузионным распространением тепла, ищется в виде $C_2 e^{-k_d z}$:

$$C_2(k_d^2 - q'^2)e^{-k_d z} = -W(p, s)\frac{\mu_0}{k_d}e^{-k_d z} \Rightarrow C_2 = -\frac{W(p, s)\mu_0}{k_d(k_d^2 - q'^2)}$$

Складывая найденные компоненты, получаем общее решение до применения граничного условия на поверхности:

$$\widetilde{\sigma}(p, s, z) = B e^{-q' z} + W(p, s) \left[\frac{1}{\mu_0^2 - q'^2} e^{-\mu_0 z} - \frac{\mu_0}{k_d(k_d^2 - q'^2)} e^{-k_d z} \right]. \quad (3.24)$$

Для определения неизвестной константы B воспользуемся физическим условием свободной поверхности облучаемой мишени (3.4): при $z = 0$ нормальные МН отсутствуют [1, 3]. В пространстве интегральных преобразований это условие записывается как $\widetilde{\sigma}(p, s, 0) = 0$. Подставляя $z = 0$ в уравнение (3.24), находим B :

$$B = -W(p, s) \left[\frac{1}{\mu_0^2 - q'^2} - \frac{\mu_0}{k_d(k_d^2 - q'^2)} \right].$$

С учётом константа B и группируя слагаемые с одинаковыми знаменателями в (3.24), получим итоговое факторизованное выражение для напряжений:

$$\widetilde{\sigma}(p, s, z) = W(p, s) \left[\frac{e^{-\mu_0 z} - e^{-q' z}}{\mu_0^2 - q'^2} - \frac{\mu_0(e^{-k_d z} - e^{-q' z})}{k_d(k_d^2 - q'^2)} \right]. \quad (3.25)$$

Возвращаясь к исходным физическим параметрам (раскрывая $W(p, s)$, q' , $\tilde{f}(p)$ и k_d), записываем окончательное точное аналитическое решение в общем виде:

$$\begin{aligned} \widetilde{\sigma}(p, s, z) = & \frac{\gamma g Q_0 \bar{\Phi}(s) p^2 / v_s^2}{C_e C_i (p - p_3)(p - p_1)(p - p_0)} \times \\ & \times \left[\frac{e^{-\mu_0 z} - e^{-zp/v_s}}{\mu_0^2 - q'^2} - \frac{\mu_0 \left(e^{-z\sqrt{\frac{C_e}{k_e}}\sqrt{p-p_2}} - e^{-zp/v_s} \right)}{\sqrt{\frac{C_e}{k_e}}\sqrt{p-p_2} \left(\frac{C_e}{k_e}(p-p_2) - (p/v_s)^2 \right)} \right]. \end{aligned} \quad (3.26)$$

Здесь $p_0 = -\alpha$, $p_1 = -\frac{g+k_e s^2 - k_e \mu_0^2}{C_e}$, $p_2 = -\frac{g+k_e s^2}{C_e}$, $p_3 = -g/C_i$.

Теперь разложим выражения в знаменателях дробей внутри квадратных скобок, чтобы выделить характеристические полюсы акустических мод.

$$\mu_0^2 - q'^2 = \mu_0^2 - \frac{p^2}{v_s^2} = -\frac{1}{v_s^2}(p^2 - \mu_0^2 v_s^2) = -\frac{1}{v_s^2}(p - p_4)(p - p_5).$$

Здесь введены корни $p_4 = \mu_0 v_s$ и $p_5 = -\mu_0 v_s$.

Второй знаменатель:

$$\frac{C_e}{k_e}(p - p_2) - q'^2 = \frac{C_e}{k_e}(p - p_2) - \frac{p^2}{v_s^2} = -\frac{1}{v_s^2}\left(p^2 - v_s^2 \frac{C_e}{k_e} p + v_s^2 \frac{C_e}{k_e} p_2\right).$$

Это классический квадратный трехчлен относительно p . Найдём его корни p_6 и p_7 :

$$p_{6,7} = \frac{v_s^2 C_e}{2k_e} \pm \sqrt{\left(\frac{v_s^2 C_e}{2k_e}\right)^2 - \frac{v_s^2 C_e}{k_e} p_2}.$$

Следовательно, знаменатель сворачивается к виду:

$$\frac{C_e}{k_e}(p - p_2) - q'^2 = -\frac{1}{v_s^2}(p - p_6)(p - p_7).$$

Подставим разложенные знаменатели обратно в уравнение (3.26) получим:

$$\begin{aligned} \tilde{\sigma}(p, s, z) = & -\frac{\gamma g Q_0 \bar{\phi}(s) p^2}{C_i C_e (p - p_0)(p - p_1)(p - p_3)} \times \\ & \times \left[\frac{e^{-\mu_0 z} - e^{-p \frac{z}{v_s}}}{(p - p_4)(p - p_5)} - \frac{\mu_0 \left(e^{-z \sqrt{\frac{C_e}{k_e}} \sqrt{p - p_2}} - e^{-p \frac{z}{v_s}} \right)}{\sqrt{\frac{C_e}{k_e}} \sqrt{p - p_2} (p - p_6)(p - p_7)} \right]. \end{aligned}$$

Следуя логике разделения на спектральные θ - функции, явно выделим корень $\theta_2(p) = \frac{1}{\sqrt{p - p_2}}$ и представим точное общее решение для напряжений в виде алгебраической суммы четырех независимых пространственно-временных компонент:

$$\tilde{\sigma}(p, s, z) = \theta_5(p) - \theta_6(p) - \theta_2(p)\theta_7(p) + \theta_2(p)\theta_8(p)$$

Для факторизации рациональных дробей используется метод разложения на простые множители. Введём весовые амплитудные коэффициенты

$$A_j = \frac{-p_j^2}{\prod_{m \neq j} (p_j - p_m)} \text{ для первого набора полюсов } j \in \{0, 1, 3, 4, 5\} \text{ и } B_l = \frac{-p_l^2}{\prod_{n \neq l} (p_l - p_n)} \text{ для}$$

второго набора $l \in \{0, 1, 3, 6, 7\}$. При такой подстановке θ - функции принимают строго аналитический вид, готовый для обратного преобразования:

$$\theta_5(p) = \frac{\gamma g Q_0 \bar{\phi}(s)}{C_i C_e} e^{-\mu_0 z} \sum_j \frac{A_j}{p - p_j}, \quad \theta_6(p) = \frac{\gamma g Q_0 \bar{\phi}(s)}{C_i C_e} e^{-p z / v_s} \sum_j \frac{A_j}{p - p_j},$$

$$\theta_7(p) = \frac{\gamma g Q_0 \bar{\Phi}(s) \mu_0 v_s^2}{C_i C_e \sqrt{C_e/k_e}} e^{-z \sqrt{\frac{C_e}{k_e}} \sqrt{p-p_2}} \sum_l \frac{B_l}{p-p_l}, \theta_8(p) = \frac{\gamma g Q_0 \bar{\Phi}(s) \mu_0 v_s^2}{C_i C_e \sqrt{C_e/k_e}} e^{-pz/v_s} \sum_l \frac{B_l}{p-p_l}.$$

Переход в физическое пространство времени осуществляется путем точного обратного преобразования Лапласа от каждой функции. Для компонент $\theta_6(p)$ и $\theta_8(p)$, содержащих множитель e^{-pz/v_s} , согласно теореме запаздывания закономерно возникает функция Хэвисайда $H(t - z/v_s)$, физически описывающая волновой фронт упругого напряжения, бегущего со скоростью продольного звука v_s .

Оригиналы первых двух напряжений, генерируемых прямым поглощением энергии по Лямшеву, имеют вид:

$$\mathcal{L}^{-1}\{\theta_5(p)\} = \frac{\gamma g Q_0 \bar{\Phi}(s)}{C_i C_e} e^{-\mu_0 z} \sum_j A_j e^{p_j t},$$

$$\mathcal{L}^{-1}\{\theta_6(p)\} = \frac{\gamma g Q_0 \bar{\Phi}(s)}{C_i C_e} H\left(t - \frac{z}{v_s}\right) \sum_j A_j e^{p_j(t-z/v_s)}.$$

Для обращения диффузионных произведений $\theta_2(p)\theta_7(p)$ и $\theta_2(p)\theta_8(p)$, содержащих точку ветвления, применяется вспомогательная интегральная функция $\Omega(k, p_2, a, t)$ (определенная ранее при поиске оригиналов T_e и T_i в разделе 2.4), которая точно описывает пространственное размытие термоакустического ядра:

$$\mathcal{L}^{-1}\{\theta_2(p)\theta_7(p)\} = \frac{\gamma g Q_0 \bar{\Phi}(s) \mu_0 v_s^2}{C_i C_e \sqrt{C_e/k_e}} \sum_l B_l \Omega\left(p_l, p_2, z \sqrt{\frac{C_e}{k_e}}, t\right),$$

$$\mathcal{L}^{-1}\{\theta_2(p)\theta_8(p)\} = \frac{\gamma g Q_0 \bar{\Phi}(s) \mu_0 v_s^2}{C_i C_e \sqrt{C_e/k_e}} H\left(t - \frac{z}{v_s}\right) \sum_l B_l \Omega\left(p_l, p_2, 0, t - \frac{z}{v_s}\right).$$

В результате, полное аналитическое распределение ТУН $\sigma(s, z, t)$ в пространстве Ханкеля находится путем линейной суперпозиции найденных оригиналов:

$$\sigma = \mathcal{L}^{-1}\{\theta_5\} - \mathcal{L}^{-1}\{\theta_6\} - \mathcal{L}^{-1}\{\theta_2\theta_7\} + \mathcal{L}^{-1}\{\theta_2\theta_8\}.$$

Для получения окончательного трехмерного распределения ТУН в реальном физическом пространстве и времени необходимо выполнить обратное интегральное преобразование Ханкеля нулевого порядка по радиальной переменной s . Согласно свойствам преобразования Ханкеля, искомая функция

МН определяется как несобственный интеграл от произведения спектральной плотности напряжений на функцию Бесселя первого рода нулевого порядка $J_0(rs)$ и радиальную частоту s . Подставляя ранее найденные оригиналы Лапласа для соответствующих тета-функций, общее аналитическое решение для нормальной компоненты тензора напряжений принимает вид:

$$\sigma(r, z, t) = \int_0^\infty [\sigma_1(s, z, t) - \sigma_2(s, z, t) - \sigma_3(s, z, t) + \sigma_4(s, z, t)] s J_0(sr) ds, \quad (3.27)$$

где подынтегральные функции имеют следующие формы:

$$\begin{aligned} \sigma_1(s, z, t) &= \frac{\gamma g Q_0 \bar{\Phi}(s)}{C_i C_e} e^{-\mu_0 z} \sum_j A_j e^{p_j t}, \\ \sigma_2(s, z, t) &= \frac{\gamma g Q_0 \bar{\Phi}(s)}{C_i C_e} H\left(t - \frac{z}{v_s}\right) \sum_j A_j e^{p_j(t - z/v_s)}, \\ \sigma_3(s, z, t) &= \frac{\gamma g Q_0 \bar{\Phi}(s) \mu_0 v_s^2}{C_i C_e \sqrt{C_e/k_e}} \sum_l B_l \Omega\left(p_l, p_2, z \sqrt{\frac{C_e}{k_e}}, t\right), \\ \sigma_4(s, z, t) &= \frac{\gamma g Q_0 \bar{\Phi}(s) \mu_0 v_s^2}{C_i C_e \sqrt{C_e/k_e}} H\left(t - \frac{z}{v_s}\right) \sum_l B_l \Omega\left(p_l, p_2, 0, t - \frac{z}{v_s}\right). \end{aligned}$$

Выражение (3.14) является решением выше сформулированной задачи. Используя эти выражения, мы провели численный расчет временного и пространственного распределения акустического сигнала в пластинки из меди (Cu), теплофизические параметры которой при $T = 300$ К приведены в таблицах 2.1 и 3.1. Результаты численного расчета иллюстрированы на рисунках 3.8 - 3.9.

На рис. 3.8 представлена поведение ТУН на наноразмерных глубинах определяется суперпозицией локального теплового расширения решетки и волны разгрузки, приходящей от свободной поверхности. Начальная фаза характеризуется резким ростом напряжения сжатия (отрицательные значения), вызванным практически мгновенным нагревом электронной подсистемы и последующей передачей энергии ионам решетки. Инверсия знака напряжения и переход в фазу растяжения происходят строго в моменты времени $t = z/v_s$, что соответствует приходу импульса компенсации от границы $z = 0$,

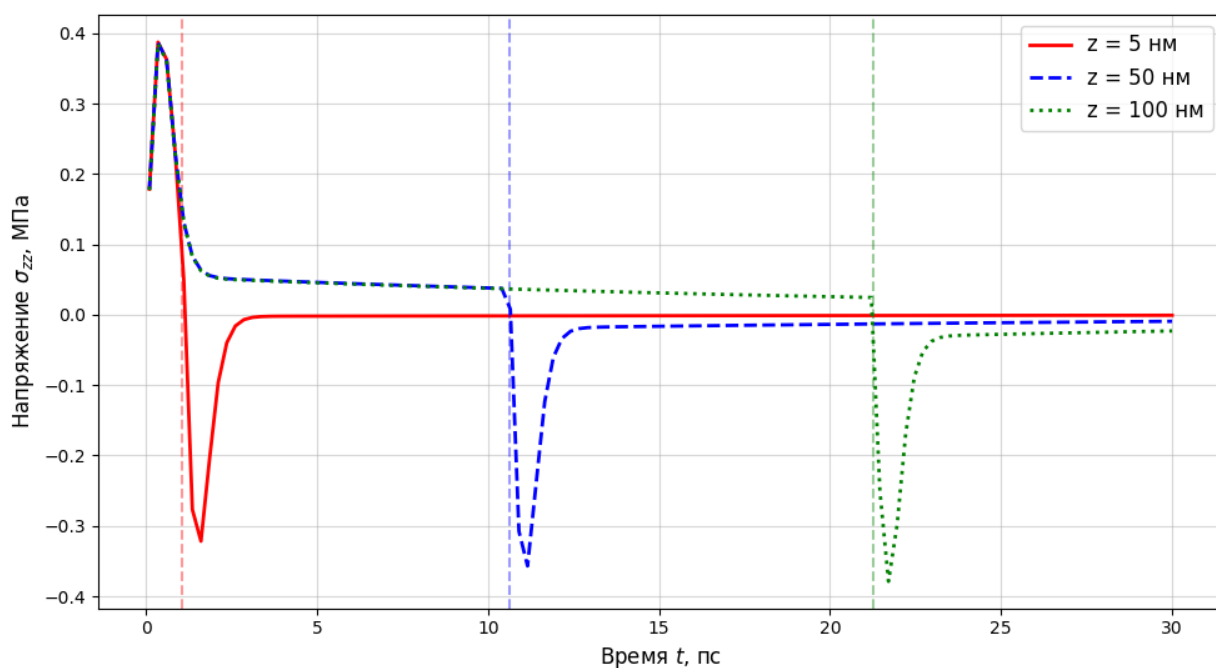


Рис. 3.8. Временная зависимость нормальной компоненты МН σ_{zz} в медной мишени (Cu) на оси трека ($r = 400$ нм) на сверхмалых глубинах $z = 5, 50, 100$ нм.

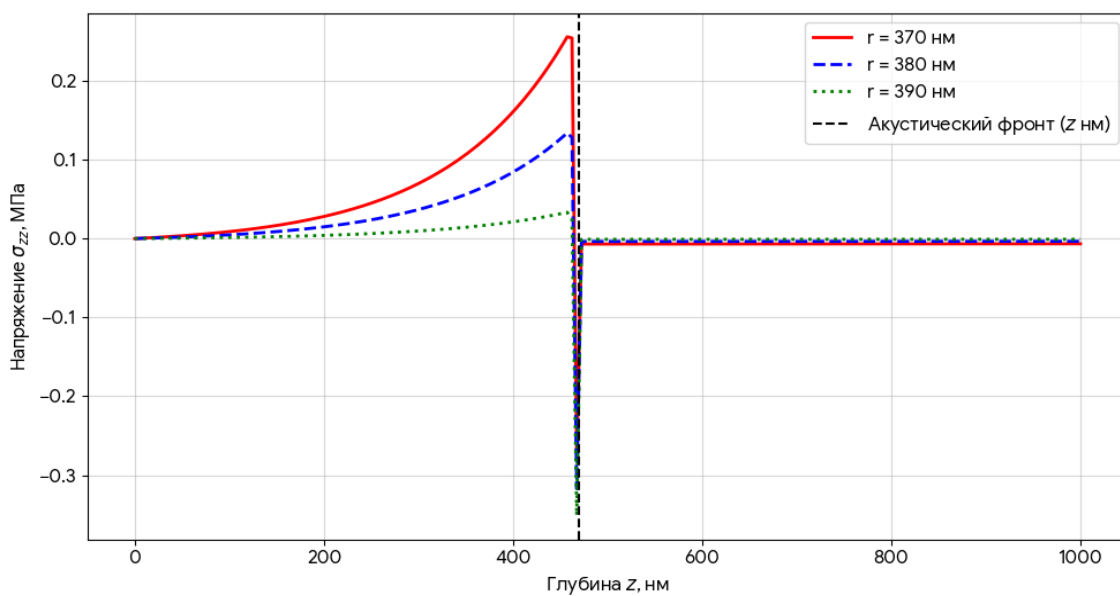


Рис. 3.9. Пространственное распределение ТУН σ_{zz} по глубине z в полубесконечной медной мишени (Cu) в момент времени $t = 100$ пс для различных радиальных расстояний ($r = 370$ нм, 380 нм, 390 нм).

необходимого для соблюдения условия свободной поверхности $\sigma = 0$. Сдвиг пиков растяжения в область больших времен при увеличении z и их амплитудная трансформация подтверждают конечную скорость распространения акустического сигнала и динамику релаксации энергии в объеме материала.

На рис. 3.9 представлено пространственное распределение МН $\sigma_{zz}(z)$ в меди (Cu) на момент времени $t = 100$ пс, рассчитанное в рамках модели с затуханием электронных потерь (аппроксимация Лямшева). Данный график визуализирует профиль АВ, инициированной сверхбыстрым термоупругим расширением, и бегущей вглубь кристалла. Отчетливо виден волновой фронт, локализованный на глубине $z = v_s t \approx 470$ нм, что строго соответствует скорости продольного звука в меди. Форма импульса демонстрирует характерный биполярный профиль (сжатие-растяжение), формирующийся в результате суперпозиции локального термического давления и волны разгрузки, отраженной от свободной поверхности мишени ($z = 0$). Сравнение кривых для различных радиальных дистанций от оси трека (370 нм, 380 нм и 390 нм) показывает плавное радиальное затухание амплитуды акустического сигнала, составляющей единицы мегапаскалей (МПа) на данных удалениях, что подтверждает цилиндрическую расходимость упругого поля.

3.4. Генерация акустических волн в полубесконечных образцах при воздействии ионного пучка, представленного в виде эквивалентного поверхностного источника тепла

Очевидно, что при взаимодействии пучков БТИ с металлическими системами происходит ее локальный нагрев. При этом в системе также генерируется АИ, вызванные соответствующими возмущениями температуры [50-70]. Когда пучок ионов с эффективной длительностью t_0 падает в поперечном положительном направлении оси цилиндрический твердотельной мишени энергия ионов передается материалу мишени в плоском приповерхностном слое вещества. В результате быстрого теплового расширения материала мишени, вызванное воздействием пучка БТИ, возбуждается АВ [12-14]. Эти

волны распространяются в противоположных направлениях вдоль оси z , перпендикулярной поверхности мишени. Волна, распространяющаяся в направлении от поверхности мишени (отрицательное направление оси z), отражается от границы раздела "мишень - вакуум". При отражении происходит инверсия фазы волны, что приводит к изменению ее полярности. Отраженная волна затем частично интерферирует с прямой волной, распространяющейся вглубь мишени (положительное направление оси z). В результате интерференции формируется биполярный АИ. Этот импульс представляет собой суперпозицию прямой и отраженной волн, характеризующуюся чередованием областей сжатия и разрежения. Биполярный импульс распространяется вглубь мишени как единое целое со скоростью продольной звуковой волны v_s . Целью настоящего раздела работы является теоретическое исследование особенностей возбуждения АИ в металлических образцах под действием пучком БТИ.

Исходные уравнения термоупругости в рамках упрощенном МТП в цилиндрической системе координат, с учётом аксиальной симметрии имеет следующий вид [1,8,12,13,23]:

$$\kappa_e \left(\frac{1}{r} \frac{\partial T_e}{\partial r} + \frac{\partial^2 T_e}{\partial r^2} + \frac{\partial^2 T_e}{\partial z^2} \right) = g(T_e - T_i), \quad (3.28)$$

$$C_i \frac{\partial T_i}{\partial t} = g(T_e - T_i), \quad (3.29)$$

$$\nabla^2 \sigma - \frac{1}{v_s^2} \frac{\partial^2 \sigma}{\partial t^2} = -\frac{\beta_v}{K v_s^2} \frac{\partial^2 T_i}{\partial t^2}. \quad (3.30)$$

Очевидно, что для решения уравнение (3.30) необходимо иметь явное выражение для нестационарной ТП решетки $\hat{T}_i'(s, z, p)$. Это выражение нам получен в разделе 2.5 при начальных и граничных условиях (2.48), и здесь их не приводим.

Для решения уравнения (3.30) используем начальные и граничные условия как (3.4). Выполняя преобразование Лапласа по t и Ханкеля по r от уравнении (3.30) с начальными условиями (3.4) и с учётом (2.55), получим

$$\frac{d^2 \hat{\sigma}(s, z, p)}{dz^2} - q^2 \hat{\sigma}(s, z, p) = -\Phi(s, p) e^{-\psi z}, \quad (3.31)$$

где $\psi(s, p) = \sqrt{s^2 + \frac{C_i g p}{\kappa_e(C_i p + g)}}$, $q(s, p) = \sqrt{p^2/v_s^2 + s^2}$,

$$\Phi(s, p) = \frac{\beta_V \alpha r_0 S_e g e^{-r_0^2 s^2/4} p^2}{2\sqrt{2\pi\kappa_e C_i K v_s^2} \sqrt{(g + \kappa_e s^2)(p + \alpha)} \sqrt{\left(p + \frac{\kappa_e s^2 g}{C_i(g + \kappa_e s^2)}\right)(p + g/C_i)}}.$$

Уравнение (3.31) будем решать методом вариации постоянных. Пусть

$$\hat{\sigma}(s, z, p) = c_1 e^{qz} + c_2 e^{-qz}. \quad (3.32)$$

Тогда согласно методу вариации постоянных получим систему

$$\begin{cases} c_1'(z) e^{qz} + c_2'(z) e^{-qz} = 0 \\ c_1'(z) e^{qz} - c_2'(z) e^{-qz} = -\frac{\Phi(s, p) e^{-\psi z}}{q} \end{cases}$$

Отсюда получим

$$c_1(z) = \frac{\Phi(s, p) e^{-(\psi+q)z}}{2q(\psi+q)} + \gamma_1, \quad c_2(z) = -\frac{\Phi(s, p) e^{-(\psi-q)z}}{2q(\psi-q)} + \gamma_2.$$

Подставляя эти выражения в (3.32), получим

$$\hat{\sigma}(s, z, p) = \gamma_1 e^{qz} + \gamma_2 e^{-qz} + \frac{\Phi(s, p) e^{-\psi z}}{q^2 - \psi^2}. \quad (3.33)$$

Чтобы решение уравнения (3.33) сходило [121], и в силу граничных условий задачи (3.4), получим

$$\gamma_2 = -\frac{\Phi(s, p)}{q^2 - \psi^2}.$$

Подставляя значения γ_1 и γ_2 в равенство (3.33), получим

$$\begin{aligned} \hat{\sigma}(s, z, p) &= \frac{\Phi(s, p)(e^{-\psi z} - e^{-qz})}{q^2 - \psi^2} = \frac{\Phi(s, p) \kappa_e (C_i p + g) v_s^2 (e^{-\psi z} - e^{-qz})}{\kappa_e (C_i p + g) p^2 - C_i p g v_s^2} = \\ &= \frac{\beta_V \alpha r_0 S_e g e^{-r_0^2 s^2/4}}{2\sqrt{2\pi\kappa_e C_i K} \sqrt{(g + \kappa_e s^2)}} \frac{p(p + g/C_i)(e^{-\psi z} - e^{-qz})}{\sqrt{(p - p_1)(p + g/C_i)(p - p_2)(p - p_3)(p - p_4)}} \end{aligned} \quad (3.34)$$

где $p_1 = -\frac{\kappa_e s^2 g}{C_i(g + \kappa_e s^2)}$, $p_2 = -\alpha$, $p_{3,4} = -\frac{g}{2C_i} \pm \sqrt{\frac{g(4C_i^2 v_s^2 + g\kappa_e)}{4\kappa_e C_i^2}}$.

Осуществляя обратное преобразование Ханкеля от полученного выражения, имеем:

$$\hat{\sigma}(r, z, p) = \frac{\beta_V \alpha r_0 S_e g}{2\sqrt{2\pi\kappa_e C_i K}} \int_0^\infty \frac{J_0(rs) e^{-r_0^2 s^2/4}}{\sqrt{g + \kappa_e s^2}} [\hat{\theta}_1(s, p) \hat{\theta}_2(s, z, p)] s ds, \quad (3.35)$$

где $\hat{\theta}_1(s, p) = \frac{1}{\sqrt{p - p_1}}$, $\hat{\theta}_2(s, z, p) = \frac{p\sqrt{p + g/C_i}(e^{-\psi z} - e^{-qz})}{(p - p_2)(p - p_3)(p - p_4)}$.

Используя известной теоремой свертки [28, 29] для $L^{-1}[\hat{\sigma}(s, z, p)]$ получим

$$L^{-1}[\hat{\sigma}(s, z, p)] = L^{-1}[\hat{\theta}_1(s, z, p)\hat{\theta}_2(s, p)] = \int_0^t \theta_1(s, z, \tau)\theta_2(s, t - \tau)d\tau, \quad (3.36)$$

$$\text{где } \theta_1(s, t) = L^{-1}[\hat{\theta}_1(s, p)] = \frac{e^{p_1 t}}{\Gamma(0.5)\sqrt{t}} = \frac{e^{p_1 t}}{\sqrt{\pi t}},$$

$$\begin{aligned} \theta_2(s, z, t) = L^{-1}[\hat{\theta}_2(s, z, p)] = & \frac{1}{(p_2 - p_3)(p_2 - p_4)(p_3 - p_4)} \times \\ & \times [(p_3 - p_4)p_2\sqrt{p_2 + g/C_i}(e^{p_2[t-\psi(p_2)z/p_2]} - e^{p_2[t-q(p_2)z/p_2]}) - \\ & - (p_2 - p_4)p_3\sqrt{p_3 + g/C_i}(e^{p_3[t-\psi(p_3)z/p_3]} - e^{p_3[t-q(p_3)z/p_3]}) + \\ & + (p_2 - p_3)p_4\sqrt{p_4 + g/C_i}(e^{p_4[t-\psi(p_4)z/p_4]} - e^{p_4[t-q(p_4)z/p_4]})] \end{aligned}$$

Тогда после преобразование обратного Лапласа, получим

$$\sigma(r, z, t) = \frac{\beta_V \alpha r_0 S_e g}{2\sqrt{2\pi\kappa_e} C_i K} \int_0^\infty \frac{J_0(rs)e^{-r_0^2 s^2/4}}{\sqrt{g + \kappa_e s^2}} \left[\int_0^t \theta_1(s, \tau)\theta_2(s, z, t - \tau)d\tau \right] s ds \quad (3.37)$$

С целью чтобы отобразить отраженную волну от поверхности образца в противоположном направлении оси z , производим следующую замену [70, 109] $\theta_2(s, z, t) \rightarrow \theta_2(s, z, t) - \theta_2(s, -z, t)$, тогда получим

$$\begin{aligned} \sigma(r, z, t) = & \frac{\beta_V \alpha r_0 S_e g}{2\sqrt{2\pi\kappa_e} C_i K} \int_0^\infty \frac{J_0(rs)e^{-r_0^2 s^2/4}}{\sqrt{g + \kappa_e s^2}} \times \\ & \times \left\{ \int_0^t \theta_1(s, \tau)\theta_2(s, z, t - \tau)d\tau s ds - \left[\int_0^t \theta_1(s, \tau)\theta_2(s, -z, t - \tau)d\tau \right] s ds \right\} \quad (3.38) \end{aligned}$$

Выражение (3.38) является решением выше сформулированной задачи. Используя этот выражения, мы провели численный расчет временного и пространственного распределения акустического сигнала в металлическом образце из золота (Au), теплофизические параметры которой при $T=300$ приведены в таблицах 2.1 и 3.1. Результаты численного расчета иллюстрированы на рисунках 3.10 - 3.12.

На рис. 3.10 показана динамика МН, возбуждаемого мишени (Au) импульсными пучками ионов урана с энергией 5 МэВ. Временная зависимость пучка соответствует гауссовой. Нетрудно заметить, что положение пика импульса соответствует значению $t \approx C_e/g$.

На рис. 3.11 показаны профили МН вдоль трека иона в разных моменты времени ($1-t = 0.5$ пс, $2-t = 1$ пс, $3-t = 2$ пс) в металлическом образце из

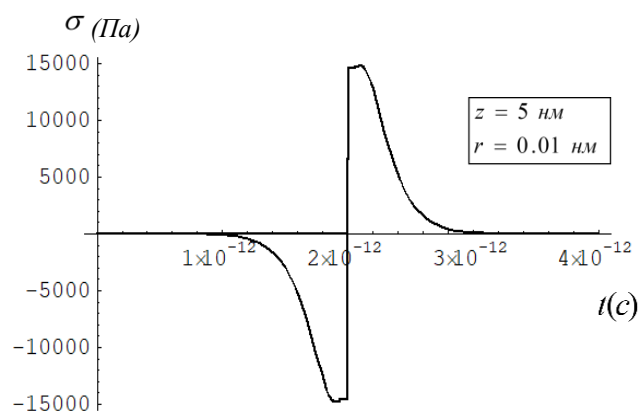


Рис. 3.10. Временная зависимость МН в мишени (Au) при облучении ионами урана с начальной энергией 5 МэВ/а.е.м.

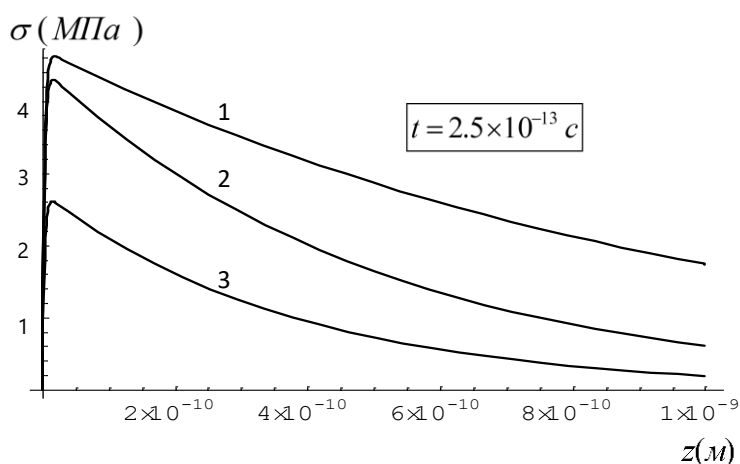


Рис. 3.11. Распределение МН по глубине образца из золота при облучении ионами урана с начальной энергией 5 МэВ/а.е.м.: 1- $r = 0.005$ нм, 2- $r = 0.05$ нм, 3- $r = 0.5$ нм

золота облучаемого ионом урана с начальной энергией 5 МэВ/а.е.м. в центре мишени ($r = 0$). Уровень напряжений высок вблизи поверхности и резко снижается с увеличением расстояния. Более того, на некотором расстоянии под поверхностью уровень напряжений падает до нуля. Глубина, на которой напряжение равно нулю, увеличивается со временем. Это указывает на то, что АВ распространяется вглубь подложки со скоростью v_s .

На рис. 3.12 иллюстрирована профиль МН в момент времени $t = 5$ пс при $z = 1, 2, 4$ нм. График отражает формирование вблизи трека БТИ узкой

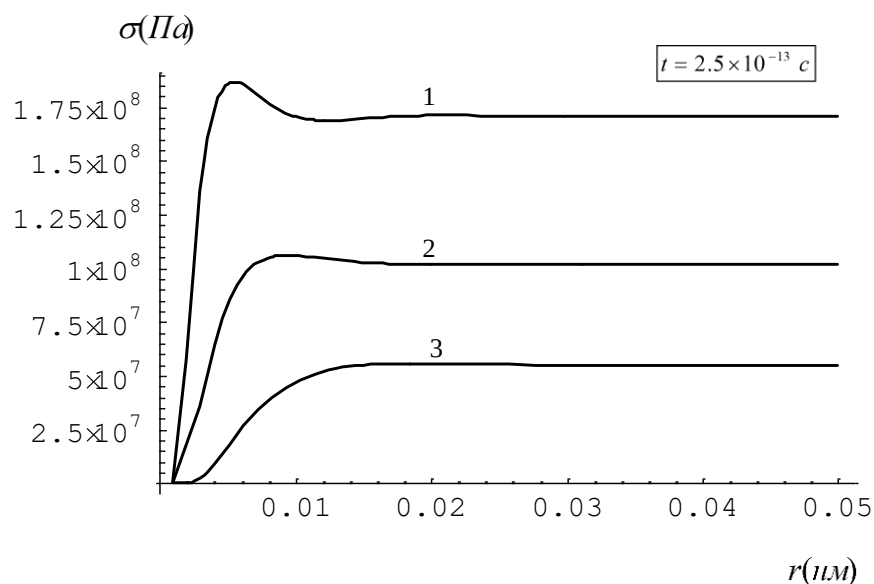


Рис. 3.12. Радиальное распределение МН в образце из золота при облучении ионами урана с начальной энергией 5 МэВ/а.е.м.: 1- $z = 1$ нм, 2- $z = 2$ нм, 3- $z = 4$ нм.

области экстремально высоких МН, максимум которых достигается при малых радиусах вследствие быстрого локального разогрева электронной подсистемы и последующей передачи энергии к решётке. По мере увеличения радиуса наблюдается спад $\sigma(r)$ и выход на стационарный уровень, что обусловлено теплопроводностным переносом энергии и вязкоупругой релаксацией материала. При увеличении характерного размера зоны ($z = 1$ нм до 4 нм) амплитуда напряжений уменьшается, а профиль становится более гладким и широким.

Таким образом, исходя из уравнения термоупругости в рамках упрощенной МТП, теоретически исследованы особенности возбуждения АИ в металлах. Получены выражения, описывающие пространственно-временное распределение ТП (электронов и решетки) и возбуждения АИ в металлах при облучении потоком БТИ представленного в виде эквивалентного поверхностного источника тепла. Результаты численного расчета раскрывают все особенности формирования возмущения ТУН в металлах.

ВЫВОДЫ

На основе разработанной аналитической модели и решения системы уравнений в рамках двухтемпературного приближения установлено, что пространственно-временная эволюция ТП в металлах критически зависит от нестационарной динамики межподсистемного теплопереноса. Показано, что интенсивность электрон-фононного взаимодействия определяет скорость релаксации энергии от высоковозбужденного электронного газа к кристаллической решетке, выступая главным фактором формирования термического пика.

Теоретически показано, что учет пространственно-временного распределения энергии пучка БТИ выявляет сильную нелинейную зависимость пиковых значений температур от длительности радиационного воздействия. Аналитические расчеты демонстрируют, что сокращение времени энерговыклада приводит к резкому росту максимальной температуры электронной подсистемы, в то время как инерционность разогрева самой решетки лимитируется механизмами электронной и решеточной теплопроводности.

Выявлено, что распределение ТП локальной зоне нагрева носит существенно неоднородный характер, экспоненциально затухая по глубине мишени и подчиняясь гауссовому закону в радиальном направлении. Возникающий вследствие этого пространственный градиент температур выступает фундаментальной причиной и первичным источником формирования значительных по величине нормальных ТУН вдоль оси ионного трека.

В рамках единого теоретического подхода строго описан механизм трансформации тепловой энергии локального термического пика в высокочастотные упругие волны. Показано, что термоупругий отклик металла на импульсное воздействие тяжелых ионов формируется, как сложная суперпозиция мгновенного теплового расширения решетки, учитывающая эффекты встречных релаксационных процессов.

Выявлено, что из-за ТУН возникают локальные зоны с экстремальными амплитудными значениями напряжений сжатия и растяжения и, в результате,

формируется биполярный АИ. Расчеты подтверждают, что в непосредственной близости от оси трека амплитуда генерируемых МН способна превышать динамический предел упругости материала, что создает необходимые теоретические предпосылки для объяснения наблюдаемого в экспериментах формирования локальных зон пластической деформации.

Сопоставление результатов разработанной аналитической модели термоупругого отклика с доступными экспериментальными данными по облучению металлов, показавшее их высокую степень сходимости. Показано, что параметры генерируемых АВ адекватно отражают кинетику термического пика и микроструктурные особенности материала, что теоретически обосновывает применимость данной модели для развития современных методов неразрушающей акустической диагностики радиационной стойкости.

ЛИТЕРАТУРА

1. Каганов М.И., Лифшиц И.М., Танатаров Л.В. Релаксация между электронами и решеткой // ЖЭТФ. – 1956. – Т. 31. – № 2(8). – С. 232-237.
2. Лифшиц И.М. О температурных вспышках в среде, подверженной действию ядерного излучения // Доклады Академии наук СССР. – 1956. – Т. 109. – № 6. – С. 1109-1111.
3. Лифшиц И.М., Каганов М.И., Танатаров Л.В. К теории радиационных изменений в металлах // Атомная энергия. – 1959. – Т. 16. – № 4. – С. 391-402.
4. Романов С.В., Стародубцев С.В. Прохождение заряженных частиц через вещество. // Ташкент: Издательство «ФАН». – 1962. – 228 с.
5. Fleischer R.L., Price P.B., Walker R.M. Ion explosion spike mechanism for formation of charged-particle tracks in solids // Journal of Applied Physics. – 1965. – V. 36. – No. 11. – P. 3645-3652.
6. Воробьев А.А., Кононов Б.А. Прохождение электронов через вещество. // Томск: Изд-во Томск. ун-та. – 1966. – 178 с.
7. Томпсон М. Дефекты и радиационные повреждения в металлах. // М.: Мир. – 1971. – 368 с.
8. Fleischer R.L., Price P.B., Walker R.M. Nuclear Tracks in Solids: Principles and Applications. // Berkeley: University of California Press. – 1975. – 605 p.
9. Vineyard G.H. Thermal spikes and activated processes // Radiation Effects. – 1976. – V. 29. – No. 4. – P. 245-248.
10. Miller R.B. An Introduction to the Physics of Intense Charged Particle Beams. // New York: Plenum Press. – 1982. – 352 p.
11. Appleton B.R., Cellar G.K. Laser and Electron-Beam Interaction with Solids. Edited by B.R. Appleton, G.K. Cellar. // New York: Elsevier Science Publishers. – 1982. – 812 p.
12. Давыдов А.А., Калиниченко А.И. Механические эффекты вблизи ионных треков и термических пиков // Вопросы атомной науки и техники. Серия: Физика радиационных повреждений и радиационное материаловедение. – 1985. – Т. 3(36). – С. 27-30.

13. Klaumünzer S., Hou M.D., Schumacher G. Coulomb explosions in a metallic glass due to the passage of fast heavy ions // *Physical Review Letters*. – 1986. – V. 57. – P. 850-853.
14. Погребняк А.Д., Ремнев Г.Е., Чистяков С.А., Лигачев А.Е. Модификация свойств металлов под действием мощных ионных пучков // *Известия высших учебных заведений. Физика*. – 1987. – № 1. – С. 52-65.
15. Диденко А.Н., Лигачев А.Е., Куракин И.Б. Воздействие пучков заряженных частиц на поверхность металлов и сплавов. // Москва: Энергоатомиздат. – 1987. – 184 с.
16. Dufour C., Lesellier de Chezelles E., Delignon V., Paumier E., Toulemonde M. Ion track formation in amorphous metals. Edited by P. Mazzoldi. // Amsterdam: North-Holland. – 1992. – P. 61-72.
17. Toulemonde M., Paumier E., Dufour C. Thermal spike model in the electronic stopping power regime // *Radiation Effects and Defects in Solids*. – 1993. – V. 126. – No. 1-4. – P. 201-206.
18. Dufour C., Paumier E., Toulemonde M. A transient thermodynamic model for track formation in amorphous metallic alloys // *Radiation Effects and Defects in Solids*. – 1993. – V. 126. – P. 119-122.
19. Lesueur D., Dunlop A. Damage creation via electronic excitations in metallic targets. Part II: A theoretical model // *Radiation Effects and Defects in Solids*. – 1993. – V. 126. – P. 163-172.
20. Stinnett R.W., Buchheit R.G., Greulich F.A., Adler T.A., Follstaedt D.M. Thermal surface treatment using intense, pulsed ion beams // *Materials Research Society Symposium Proceedings*. – 1993. – V. 316. – P. 521-526.
21. Balanzat E., Bouffard S. Track formation in solids irradiated with swift heavy ions // *Solid State Phenomena*. – 1993. – V. 30-31. – P. 7-18.
22. Wang Z.G., Dufour C., Paumier E., Toulemonde M. The Se sensitivity of metals under swift heavy ion irradiation: a transient thermal process // *Journal of Physics: Condensed Matter*. – 1994. – V. 6. – P. 6733-6750.

23. Дидык А.Ю. Радиационное воздействие тяжелых ионов на хромоникелевую сталь при высоких температурах // Известия РАН. Металлы. – 1995. – № 3. – С. 128-135.
24. Furuno S., Otsu H., Hojou K., Nakata Y., Ishikawa T. Tracks of high-energy heavy ions in solids // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms. – 1996. – V. 107. – No. 1-4. – P. 223-226.
25. Yavlinskii Yu.N. Track formation in amorphous metals under swift heavy ion bombardment // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms. – 1998. – V. 146. – No. 1-4. – P. 142-146.
26. Бойко В.И., Валяев А.Н., Погребняк А.Д. Модификация металлических материалов импульсными мощными пучками частиц // Успехи физических наук. – 1999. – Т. 169. – № 11. – С. 1243-1271.
27. Yavlinskii Yu.N. Heating of crystalline and amorphous metals under swift heavy ion irradiation // Radiation Effects and Defects in Solids. – 2000. – V. 153. – P. 75-91.
28. Блейхер Г.А., Кривобоков В.П., Пащенко О.В. Теплофизические процессы в твердом теле при воздействии мощных импульсных пучков заряженных частиц // Известия ТПУ. – 2000. – Т. 303. – № 2. – С. 71-91.
29. Toulemonde M., Dufour C., Meftah A., Paumier E., Studer F. Transient thermal processes in heavy-ion irradiation of crystalline inorganic insulators // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms. – 2000. – V. 166–167. – P. 903–912.
30. Комаров Ф.Ф., Комаров А.Ф. Физические процессы при ионной имплантации в твердые тела. // Минск: Технопринт. – 2001. – 393 с.
31. Комаров Ф.Ф., Ювченко В.Н. Модель термического пика для описания трекообразования в кристаллах полупроводников, облучаемых тяжелыми высокоэнергетическими ионами // Журнал технической физики. – 2003. – Т. 73. – № 6. – С. 56-60.

32. Комаров Ф.Ф. Дефектообразование и трекообразование в твердых телах при облучении ионами сверхвысоких энергий // УФН. – 2003. – Т. 173. – № 12. – С. 1287-1318.
33. Watanabe T., Yamasaki D., Tatsumura K., Ohdomari I. Surface modification by ion beams // Applied Surface Science. – 2004. – V. 234. – P. 207-215.
34. Черняев А.П. Взаимодействия ионизирующего излучения с веществом. // М.: ФИЗМАТЛИТ. – 2004. – 152 с.
35. Урбанович А.И., Комаров Ф.Ф. Температурные поля и трекообразование в материалах, облучаемых ионами высоких энергий // Доклады НАН Беларуси. – 2005. – Т. 49. – № 1. – С. 54-58.
36. Метелкин Б.В., Рязанов А.И., Павлов С.А., Жемеров А.В. Влияние кулоновского взрыва на процесс образования треков в металлах при облучении тяжелыми ионами // ЖЭТФ. – 2005. – Т. 128. – № 1. – С. 139-149.
37. Амирханов И.В., Дидык А.Ю., Земляная Е.В., Пузынин И.В. и др. Численное исследование температурных эффектов в материалах при облучении их тяжелыми ионами высоких энергий в рамках уравнений теплопроводности для электронов и решетки // ЭЧАЯ. – 2006. – Т. 3. – № 1(130). – С. 63-75.
38. Амирханов И.В., Дидык А.Ю., Шарипов З.А. и др. Распыление твердых тел под действием тяжелых ионов и температурные эффекты в электронной и решеточной подсистемах // ЭЧАЯ. – 2006. – Т. 37. – № 6. – С. 1592-1644.
39. Шарипов З.А. Моделирование тепловых процессов в материалах при облучении тяжелыми ионами высоких энергий в рамках обобщенной модели термического пика // Труды XII научной конференции молодых ученых. – Дубна. – 2008. – С. 71-74.
40. 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. – Т. 1(12). – № 8. – С. 17-27.
41. Assmann W., Toulemonde M., Trautmann C. Ion track physics and applications. // Berlin-Heidelberg: Springer. – 2007. – P. 401-435.

42. Sigmund P. Particle-solid interactions // *European Physical Journal D*. – 2008. – V. 47. – P. 45-60.
43. Dash P., Mallick P., Rath H., Dash B.N., Tripathi A., Prakash J., Avasthi D.K., Satyam P.V., Mishra N.C. Surface modifications of ultra-thin gold films by swift heavy ion irradiation // *Indian Journal of Physics*. – 2010. – V. 84. – No. 10. – P. 1391-1397.
44. Szenes G. Analytical model of ion track formation // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*. – 2011. – V. 269. – P. 174-178.
45. Wesch W., Wendler E. Ion Beam Modification of Solids: Ion-Solid Interaction and Radiation Damage. // *Springer Series in Surface Sciences*. – 2016. – 534 p.
46. Комаров Ф.Ф. Нано- и микроструктурирование твёрдых тел быстрыми тяжёлыми ионами // *УФН*. – 2017. – Т. 187. – № 5. – С. 465-504.
47. Dufour C., Khomenkov V., Rizza G., Toulemonde M. Ion-matter interaction: the three-dimensional version of the thermal spike model. Application to nanoparticle irradiation with swift heavy ions // *Journal of Physics D: Applied Physics*. – 2012. – V. 45. – No. 6. – Article 065302.
48. Osmani O. Irradiation effects of swift heavy ions in matter: Dissertation. // Essen: University of Duisburg-Essen. – 2012. – 99 p.
49. Stodel C., Toulemonde M., Fransen C., Jacquot B., Fremont G., Michel M., Dufour C. Thermal spike model applied to thin targets irradiated with swift heavy ion beams at few mega-electron-volt per nucleon energies // *EPJ Web of Conferences*. – 2020. – V. 229. – Article 05001.
50. White R.M. Elastic wave generation of electron bombardment or electromagnetic wave absorption // *J. Appl. Phys.* – 1963. – V. 34. – No. 7. – P. 2123-2124.
51. Graham R.A., Hutchison R.E. Thermoelastic stress pulses resulting from pulsed electron beam // *Appl. Phys. Lett.* – 1967. – V. 11. – No. 2. – P. 69-71.

52. Лямшев Л.М., Челноков Б.И. К теории генерации звука при поглощении проникающего излучения с модулированной интенсивностью в твердом волноводе // Акуст. журнал. – 1983. – № 4. – С. 505-514.
53. Залюбовский И.И., Калиниченко А.И., Лазурик В.Т. Введение в радиационную акустику. // Харьков: Вища школа. – 1986. – 168 с.
54. Лямшев Л.М., Челноков Б.И. Основные механизмы генерации звука проникающим излучением в конденсированных средах. Под ред. Л.М. Лямшева. // М.: Наука. – 1987. – С. 8-26.
55. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теория упругости. // М.: Наука. – 1987. – 248 с.
56. Лямшев Л.М., Челноков Б.И. Генерация звука проникающим излучением в конденсированных средах. Под ред. Л.М. Лямшева. // М.: Наука. – 1987. – С. 58-133.
57. Лямшев Л.М. Радиационная акустика. // М.: Наука-Физматлит. – 1996. – 304 с.
58. Daneykin Yu.V., Boiko V.I., Yushitsin K.V. On the appearance of elastoplastic pulses generated by pulsed beams of charged particles on the rear surface of a metallic target // Russian Metallurgy (Metally). – 2001. – P. 297-301.
59. Beron R.L., Hofstadter R. Generation of mechanical vibrations by penetrating particles // Phys. Rev. Lett. – 1969. – V. 23. – P. 184-186.
60. Perry F.S. Electron beam induced stress waves in solids // Appl. Phys. Lett. – 1970. – V. 17. – No. 9. – P. 478-481.
61. Боршковский И.А., Воловик В.Д., Гришаев И.А. и др. Возбуждение ультразвуковых волн при прохождении быстрых электронов через металл // Письма ЖЭТФ. – 1971. – Т. 13. – С. 546-549.
62. Петренко В.В. Возбуждение ультразвуковых волн при прохождении быстрых электронов через металл // Письма в ЖЭТФ. – 1971. – Т. 13. – С. 546-549.

63. Боршковский И.А., Воловик В.Д., Гришаев И.А. и др. Исследования возбуждения акустических волн в металлах быстрыми заряженными частицами и γ -квантами // ЖЭТФ. – 1972. – Т. 63. – С. 1337-1341.
64. Боршковский И.А., Воловик В.Д. Исследования возбуждения акустических волн в металлах электронами и протонами // Известия вузов. Физика. – 1973. – № 10. – С. 72-76.
65. Каганова И.М., Каганов М.И. Черенковское излучение звука частицей, движущейся через металл // Физика твердого тела. – 1973. – Т. 15. – № 7. – С. 2119-2125.
66. Воловик В.Д., Калиниченко А.И., Лазурик В.Т. О природе акустического эффекта быстрых частиц в металлах // Проблемы ядерной физики и космических лучей. – 1974. – № 2. – С. 80-86.
67. Беспалько А.А., Геринг Г.И. Генерация упругих волн напряжений в твердых телах электронными пучками большой плотности // Письма в ЖТФ. – 1977. – № 4. – С. 152-154.
68. Pushkarev A., Isakova J., Kholodnaya G., Sazonov R. Sound waves generated due to the absorption of a pulsed electron beam // Advances in Sound Localization. – Vienna: INTECH. – 2011. – P. 199-223.
69. Комаров Ф.Ф., Урбанович А.И., Ювченко В.А. Термоупругая генерация продольных акустических колебаний вблизи ионных треков // Доклады НАН Беларуси. – 2006. – Т. 50. – № 3. – С. 37-43.
70. Калиниченко А.И., Стрельницкий В.Е. Возбуждение упругих волн в твердом теле импульсным пучком нерелятивистских ионов // Вестник Харьковского национального университета. Серия физическая "Ядра, частицы, поля". – 2010. – Т. 46. – № 2. – С. 35-43.
71. Амирханов И.В., Дидык А.Ю., Музафаров Д.З., Пузынин И.В., Пузынина Т.П., Саркар Н.Р., Сархадов И., Шарипов З.А. Модельное описание термоупругих напряжений в материалах при облучении тяжёлыми ионами высоких энергий // Вестник РУДН. Серия Математика. Информатика. Физика. – 2010. – № 3-2. – С. 68-71.

72. Амирханов И.В., Пузынин И.В., Пузынина Т.П., Сархадов И. Исследование термоупругих эффектов в металлах в рамках модифицированной модели термического пика // Вестник РУДН. Серия Математика. Информатика. Физика. – 2013. – № 2. – С. 77-84.
73. Boyko V.I., Daneykin Y.V., Lisov V.I., Pimenov E.Yu. Generation of mechanical waves in metals under high-power ion beam irradiation // Advanced Materials Research. – 2015. – V. 1084. – P. 225-233.
74. Deurvorst F.R., Lara G.C., Matalliotakis A. et al. A spatial and temporal characterisation of single proton acoustic waves in proton beam cancer therapy // Journal of the Acoustical Society of America. – 2022. – V. 151. – No. 2. – P. 1200-1210.
75. Bohr N. The penetration of charged particles through matter. // Matematisk-Fysiske Meddelelser. – 1948. – V. 18. – No. 8. – 144 p.
76. Seitz F., Koehler J.S. Displacement of atoms during irradiation // Solid State Physics. – 1956. – V. 2. – Pp. 305–448.
77. Lindhard J., Scharff M. Energy dissipation by heavy ions // Physical Review. – 1961. – V. 124. – P. 128-130.
78. Lindhard J., Scharff M., Schiott H.E. Range concepts and heavy ion ranges (Notes on atomic collisions II) // Matematisk-Fysiske Meddelelser. – 1963. – V. 33. – No. 14.
79. Kumakhov M.A., Komarov F.F. Energy losses and ranges of ions in solids. // Minsk: Belarusian State University Press. – 1979. – 320 p.
80. Ziegler J.F., Biersack J.P. The stopping and range of ions in matter // Nuclear Instruments and Methods. – 1982. – V. 194. – P. 93-101.
81. Ziegler J.F. Energy loss in light elements // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms. – 1985. – V. 6. – P. 270-274.
82. Rozet J.P., Stephan C., Vernhet D. Energy loss in ion-atom collisions // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms. – 1996. – V. 107. – P. 67-72.

83. Cheblukov Yu.N., Didyk A.Yu., Khalil A., Hofmann D. Sputtering of metals by heavy ions in the inelastic energy loss range // *Vacuum*. – 2002. – V. 66. – P. 133-136.
84. Schiwietz G., Czerski K., Roth M., Staufenbiel F., Grande P.L. Electronic stopping of ions in metals // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*. – 2004. – V. 226. – P. 682-688.
85. Grande P.L., Schiwietz G. Electronic and nuclear stopping of ions in solids // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*. – 2009. – V. 267. – P. 859-864.
86. Ziegler J.F., Ziegler M.D., Biersack J.P. SRIM - The stopping and range of ions in matter (2010) // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*. – 2010. – V. 268. – P. 1818-1823.
87. Toulemonde M., Assmann W., Trautmann C., Grüner F., Mieskes H.D., Kucal H., Wang Z.G. Electronic sputtering of metals and insulators by swift heavy ions // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*. – 2003. – V. 212. – P. 346-357.
88. Klaumünzer S. Thermal-spike models for ion track physics: A critical examination // *Mat.-Fys. Medd.* – 2006. – V. 52. – P. 293.
89. Assmann W., Toulemonde M., Trautmann C. Electronic sputtering with swift heavy ions. Edited by R. Behrisch, W. Eckstein // *Sputtering by Particle Bombardment (Topics in Applied Physics)*. – Springer-Verlag. – 2007. – V. 110. – P. 401-450.
90. Молоковский С.И., Сушков А.Д. Интенсивные электронные и ионные пучки. // Ленинград: Энергия. – 1972. – 158 с.
91. Budzynski P., Kamiński M., Surowiec Z., Turek M., Wiertel M. Effect of Carbon Ion Implantation and Xenon Ion Irradiation on the Tribological Properties of Titanium and Ti6Al4V Alloy // *Acta Physica Polonica A*. – 2022. – V. 142. – P. 713-722.

92. Biersack J.P., Haggmark L.G. A Monte Carlo computer program for the transport of energetic ions in amorphous targets // Nuclear Instruments and Methods. – 1980. – V. 174. – P. 257-269.
93. Waligorski M.R.P., Hamm R.N., Katz R. The radial distribution of dose around the path of a heavy ion in liquid water // Nuclear Tracks and Radiation Measurements. – 1986. – V. 11. – P. 309-319.
94. Гегузин Я.Е., Каганов М.И., Лифшиц И.М. Влияние длины свободного пробега электронов на образование трека траектории заряженной частицы в металле // Физика твердого тела. – 1973. – Т. 15. – № 8. – С. 2425-2428.
95. Бойко В.И., Евстигнеев В.В. Введение в физику взаимодействия сильноточных пучков заряженных частиц с веществом. // М. – 1988. – 136 с.
96. Белый А.В. и др. Ионно-лучевая обработка металлов, сплавов и керамических материалов. // Минск. – 1998. – 220 с.
97. Seitz F. Radiation effects in solids // Physics Today. – 1952. – V. 5. – No. 6. – P. 6.
98. Tucker C.W., Senio P. On the Nature of Thermal Spikes // Journal of Applied Physics. – 1956. – V. 27. – No. 3. – P. 207-209.
99. Rethfeld B., Kaiser A., Vicanek M., Simon G. Ultrafast dynamics of nonequilibrium electrons in metals under femtosecond laser irradiation // Phys. Rev. B: Condens. Matter. – 2002. – V. 65. – Article 214303.
100. Anisimov S.I., Kapeliovich B.L., Perelman T.L. Electron emission from metal surfaces exposed to ultrashort laser pulses // Soviet Physics JETP. – 1974. – V. 39. – P. 375-377.
101. Анисимов С.И., Имас Я.А., Романов Г.С., Ходыко Ю.В. Действие излучения большой мощности на металлы. Под ред. А.М. Бонч-Бруевича, М.А. Ельяшевича. // Москва: Наука. – 1970. – 272 с.
102. Dufour C., Audouard A., Beuneu F., Paumier E., Toulemonde M. A high-resistivity phase induced by swift heavy-ion irradiation of bismuth: a probe for thermal spike damage // Journal of Physics: Condensed Matter. – 1993. – V. 5. – No. 26. – P. 4573-4584.

103. Khara G.S., Murphy S.T., Duffy D.M. Dislocation loop formation by swift heavy ion irradiation of metals // *Journal of Physics: Condensed Matter*. – 2017. – V. 29. – No. 28. – Article 285303.
104. Darkins R., Duffy D.M. Modelling radiation effects in solids with two-temperature molecular dynamics // *Computational Materials Science*. – 2018. – V. 147. – P. 145-153.
105. Индейцев Д.А., Осипова Е.В. Двухтемпературная модель оптического возбуждения звука в проводниках // *ДАН*. – 2017. – Т. 473. – № 2. – С. 1-5.
106. Allen P.B. Theory of Thermal Relaxation of Electrons in Metals // *Physical Review Letters*. – 1987. – V. 59. – No. 13. – P. 1460-1463.
107. Medvedev N., Milov I. Electron-phonon coupling in metals at high electronic temperatures // *Phys. Rev. B*. – 2020. – V. 102. – Article 064302.
108. Kiwan S., Al-Nimr M.A. Effect of Radiative Losses on the Parabolic Two-Step Heat Conduction Model // *Japanese Journal of Applied Physics*. – 2000. – V. 39. – P. 4245-4248.
109. Паркус Г. Неустановившиеся температурные напряжения. // М.: Физматгиз. – 1963. – 256 с.
110. Tzou D.Y., Ozisik M.N., Chiffelle R.J. Hyperbolic heat conduction equation with application to short-pulse laser heating // *Journal of Heat Transfer*. – 1994. – V. 116. – P. 1034-1038.
111. Tzou D.Y. The generalized lagging response in small-scale and high-rate heating // *International Journal of Heat and Mass Transfer*. – 1995. – V. 38. – No. 17. – P. 3231-3240.
112. Al-Nimr M.A. Heat transfer mechanisms during short-duration laser heating of thin metal films // *International Journal of Thermophysics*. – 1997. – V. 18. – No. 5. – P. 1257-1268.
113. Al-Nimr M.A., Masoud S.A. Nonequilibrium laser heating of metal films // *Journal of Heat Transfer*. – 1997. – V. 119. – P. 188-190.

114. Nolte S., Momma C., Jacobs H., Tünnermann A., Chichkov B.N., Wellegehausen B., Welling H. Ablation of metals by ultrashort laser pulses // *Journal of the Optical Society of America B*. – 1997. – V. 14. – P. 2716-2722.
115. Oane M., Taca M., Tsao S.L. Two temperature model for metals: A new "radical" approach // *Lasers in Engineering*. – 2012. – V. 24. – No. 1-2. – P. 105-113.
116. Нечаев В.Н., Шуба А.В. Математическое моделирование температурного профиля металлических пленок при импульсном фотонном отжиге // *Журнал технической физики*. – 2014. – Т. 84. – № 12.
117. Lam T.T. A Generalized Heat Conduction Solution for Ultrafast Laser Heating in Metallic Films // *International Journal of Heat and Mass Transfer*. – 2014. – V. 73. – P. 330-339.
118. Anghel S.A., Oane M., Mihailescu C.N. et al. Thermal Lattice Field during Ultra-Short Laser Pulse Irradiation of Metal Targets: A Fokker-Planck Analytical Model // *Metals*. – 2023. – V. 13. – P. 1775. [DOI: 10.3390/met13101775]
119. Карслоу Г., Егер Д. Теплопроводность твердых тел. // М.: Наука. – 1964. – 488 с.
120. Бабичев А.П., Бабушкина Н.А., Братковский А.М. и др. Физические величины. Под ред. И.С. Григорьева, Е.З. Мейлихова. // М.: Энергоатомиздат. – 1991. – 1232 с.
121. Yilbas B.S., Al-Dweik A.Y., Al-Aqeeli N., Al-Qahtani H.M. Laser Pulse Heating of Surfaces and Thermal Stress Analysis. // Springer International Publishing. – 2014. – 185 p.
122. Shmidberskaya A.A., Shmidberskiy P.A., Plomodyalo R.L. Study of temperature fields under impact of fine-focused heavy ion beam onto metal substrates structure // *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering*. – 2018. – V. 327. – No. 2. – Article 022081. [DOI: 10.1088/1757-899X/327/2/022081]
123. Roberts G.E., Kaufman H. Table of Laplace transforms. // Philadelphia: Saunders. – 1966. – 367 p.
124. Градштейн И.С., Рыжик И.М. Таблицы интегралов, рядов и произведений. // СПб.: БХВ-Петербург. – 2011. – 1232 с.

СПИСОК НАУЧНЫХ ПУБЛИКАЦИЙ СОИСКАТЕЛЯ УЧЁНОЙ СТЕПЕНИ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

Статьи, опубликованные в научных журналах, рекомендованных ВАК при Президенте Республики Таджикистан

[1-А]. Салихов Т.Х., Исмаев Т.Н. Нестационарное температурное поле поверхности металлов при непрерывном облучении сильноточными ионами // Вестник ТНУ. Серия естественных наук. – Душанбе. – 2019. – № 1. – С. 113-117.

[2-А]. Салихов Т.Х., Исмаев Т.Н. Температурное поле металлов в поле гауссового импульса пучка ионов по "радикальной" модели взаимодействия // ДАН РТ. – Душанбе. – 2019. – Т. 62. – № 9-10. – С. 555-560.

[3-А]. Салихов Т.Х., Исмаев Т.Н. К теории формирования температурного поля металлов в поле гауссового пучка ионов // Вестник ТНУ. Серия естественных наук. – Душанбе. – 2020. – № 4. – С. 136-141.

[4-А]. Исмаев Т.Н. К теории формирования поля температуры в металлах под действием пучка быстрых тяжёлых ионов // Вестник ТНУ. Серия естественных наук. – Душанбе. – 2021. – № 1. – С. 136-144.

[5-А]. Салихов Т.Х., Исмаев Т.Н. К теории генерации акустических волн в металлах под действием пучка быстрых тяжёлых ионов // ДАН РТ. – Душанбе. – 2024. – Т. 67. – № 11-12. – С. 551-557.

[6-А]. Салихов Т.Х., Исмаев Т.Н. К теории формирования температурных поля и акустических колебаний в металлах под действием гауссового импульса пучка ионов // Вестник ТНУ. Серия естественных наук. – Душанбе. – 2025. – № 3. – С. 108-118.

Статьи, опубликованные в материалах международных и республиканских конференций

[7-А]. Салихов Т.Х., Исмаев Т.Н. Радиальное распределение нестационарного температурного поля поверхности металлов при непрерывном облу-

чении ионами // Матер. VI-ой межд. конф. «Современные проблемы физики». – Душанбе. – 2018. – С. 27-28.

[8-A]. Салихов Т.Х., Исмаев Т.Н. Радиальное распределение нестационарного температурного поля поверхности металлов при облучении гауссовым импульсом потока ионов // Матер. респуб. научно-теорет. конф. ППС и сотрудников ТНУ. – Душанбе. – 2019. – С. 367-368.

[9-A]. Салихов Т.Х., Исмаев Т.Н. Радиальное распределение температурного поля поверхности металлов при облучении прямоугольным импульсом потока ионов // Матер. IV-ой межд. научн. конф.: «Вопросы физической и координационной химии». – Душанбе. – 2019. – С. 337-339.

[10-A]. Салихов Т.Х., Исмаев Т.Н. Особенности формирования поля температуры в металлах при облучении гауссовой формой пучка ионов // Матер. респуб. НПК ППС и сотрудников ТНУ. – Душанбе. – 2020. – С. 396-397.

[11-A]. Салихов Т.Х., Исмаев Т.Н. К теории формирования температурного поля металлов в поле гауссового пучка ионов // Матер. респуб. НПК «Современные проблемы теории дифференциальных уравнений». – Душанбе. – 2020. – С. 219-222.

[12-A]. Салихов Т.Х., Исмаев Т.Н. К теории формирования поля температуры в металлических пластинах при облучении экспоненциальными импульсами ионного пучка // Сборник статей II-ой межд. НПК на тему «О применении дифференциальных уравнений при решении прикладных задач». – Душанбе. – 2021. – С. 149-152.

[13-A]. Салихов Т.Х., Исмаев Т.Н. К теории формирования поля температуры в металлических пластинах при облучении импульсами ионного пучка // Матер. респуб. научно-теорет. конф. ППС НИИ ТНУ. – Душанбе. – 2022. – С. 95-99.

[14-A]. Исмаев Т.Н., Салихов Т.Х. К теории генерации акустических волн в металлах под действием пучка быстрых тяжелых ионов // Матер. респуб. НПК “Развитие и достижения физической науки в годы независимости”. – Душанбе. – 2023. – С. 123-125.

[15-A]. Салихов Т.Х., Исматов Т.Н. Влияние пространственного ослабления энергии пучка быстрых тяжелых ионов на формирование температурного поля в металлах // Матер. межд. НПК на тему «Развитие новых направлений в химии и химической технологии». – Душанбе. – 2023. – С. 126-130.

[16-A]. Салихов Т.Х., Исматов Т.Н. Особенности возбуждения акустических волн в металлах импульсным пучком ионов // Матер. респуб. научно-теоретической конф. ППС НИИ ТНУ. – Душанбе. – 2025. – С. 57-61.

ПРИЛОЖЕНИЯ

В этом разделе приведены подробные вычисления некоторых интегралов.

I. Преобразование Лапласа от временной функции прямоугольного импульса.

В физических моделях, где воздействие источника ограничено во времени (например, при импульсном облучении мишени), временная зависимость $f(t)$ описывается в виде прямоугольного импульса длительностью t_0 . С использованием функции Хевисайда $\theta(t)$ данное выражение записывается как:

$$f(t) = \theta(t) - \theta(t - t_0)$$

Данная функция принимает значение, равное единице, в интервале $0 \leq t < t_0$, и равна нулю во все остальные моменты времени. Изображение Лапласа $F(p)$ для такого импульса находится путем интегрирования оригинала с весовым экспоненциальным множителем:

$$F(p) = \int_0^{\infty} [\theta(t) - \theta(t - t_0)] e^{-pt} dt$$

Учитывая свойства функции Хевисайда, область интегрирования ограничивается пределом от 0 до t_0 , так как при $t > t_0$ подынтегральное выражение обращается в нуль:

$$F(p) = \int_0^{t_0} e^{-pt} dt$$

Выполняя элементарное интегрирование, получаем:

$$F(p) = \left[-\frac{1}{p} e^{-pt} \right]_0^{t_0} = -\frac{1}{p} (e^{-pt_0} - e^0)$$

Раскрывая скобки и учитывая, что $e^0 = 1$, приходим к окончательному аналитическому виду изображения прямоугольного импульса:

$$F(p) = \frac{1 - e^{-pt_0}}{p}$$

II. Преобразование Ханкеля от экспоненциального источника радиальной зависимости

Для полноты математического описания моделей треков ионов приведем детальный вывод преобразования Ханкеля для радиальной функции источника вида $D(r) = e^{-r/r_0}$.

Образ функции $\tilde{D}(s)$ в пространстве Ханкеля нулевого порядка определяется как:

$$\tilde{D}(s) = \int_0^\infty e^{-r/r_0} J_0(sr) r dr$$

Для решения воспользуемся интегралом Липшица из справочника Градштейна и Рыжика [124], (формула 6.623.1):

$$\int_0^\infty e^{-\alpha r} J_0(sr) dr = \frac{1}{\sqrt{\alpha^2 + s^2}}$$

Чтобы получить под знаком интеграла множитель r , продифференцируем обе части тождества по параметру α :

$$\frac{d}{d\alpha} \left[\int_0^\infty e^{-\alpha r} J_0(sr) dr \right] = \frac{d}{d\alpha} (\alpha^2 + s^2)^{-1/2}$$

Слева получаем:

$$\int_0^\infty (-r) e^{-\alpha r} J_0(sr) dr$$

Справа, используя правило дифференцирования сложной функции:

$$-\frac{1}{2} (\alpha^2 + s^2)^{-3/2} \cdot 2\alpha = -\frac{\alpha}{(\alpha^2 + s^2)^{3/2}}$$

Сокращая знаки минус и выполняя замену $\alpha = 1/r_0$, приходим к искомому выражению:

$$\tilde{D}(s) = \frac{1/r_0}{((1/r_0)^2 + s^2)^{3/2}}$$

Приводя выражение к общему знаменателю в скобках, получаем финальный вид образа Ханкеля:

$$\tilde{D}(s) = \frac{r_0^2}{(1 + r_0^2 s^2)^{3/2}}$$

III. Вычисления нормировочного множителя для пучка ионов ступенчатом виде.

Нормировочный множитель b определяется из условий нормировки (1.11):

$$\int_{t=0}^{\infty} \int_{r=0}^{\infty} 2\pi A(r, t) r dr dt = S_e.$$

$$\int_0^{\infty} \int_0^{\infty} 2\pi [b S_e (\theta(t) - \theta(t - t_0)) e^{-r/r_0}] r dr dt = S_e$$

Вынесем константы $2\pi, b$ и S_e за знаки интегралов и разделим переменные r и t :

$$2\pi b S_e \left(\int_0^{\infty} (\theta(t) - \theta(t - t_0)) dt \right) \left(\int_0^{\infty} r e^{-r/r_0} dr \right) = S_e$$

Функция $f(t) = \theta(t) - \theta(t - t_0)$ представляет собой прямоугольный импульс, который равен 1 только в интервале от 0 до t_0 , и 0 в остальное время. Следовательно:

$$\int_0^{\infty} (\theta(t) - \theta(t - t_0)) dt = \int_0^{t_0} 1 dt = t_0$$

Интеграл вида $\int_0^{\infty} r e^{-r/r_0} dr$ является табличным (интегрирование по частям):

$$\int_0^{\infty} r e^{-r/r_0} dr = r_0^2$$

Теперь подставим результаты вычислений обратно в уравнение:

$$2\pi b S_e(t_0)(r_0^2) = S_e$$

Отсюда находим искомую константу:

$$b = \frac{1}{2\pi t_0 r_0^2}$$

IV. Вычисления нормировочного множителя для пучка ионов экспоненциально затухающим виде

Рассмотрим первый множитель в квадратных скобках. Это интеграл от плотности вероятности экспоненциального распределения:

$$\int_0^{\infty} \exp\left(-\frac{t}{t_0}\right) dt$$

Выполняя интегрирование, получаем:

$$\int_0^{\infty} e^{-t/t_0} dt = t_0 [e^{-t/t_0}]_0^{\infty} = t_0(0 - 1) = -t_0$$

Рассмотрим второй множитель. Вынесем константы 2π и S_e за знак интеграла:

$$I_r = 2\pi S_e \int_0^{\infty} r \exp\left(-\frac{r^2}{r_0^2}\right) dr$$

Для решения используем подстановку $u = \frac{r^2}{r_0^2}$, тогда $du = \frac{2r}{r_0^2} dr$, что дает $r dr = \frac{r_0^2}{2} du$:

$$I_r = 2\pi S_e \frac{r_0^2}{2} \int_0^{\infty} e^{-u} du = \pi r_0^2 S_e \cdot [-e^{-u}]_0^{\infty} = \pi r_0^2 S_e$$

Подставим полученные значения интегралов в исходное уравнение:

$$b \cdot [t_0] \cdot [\pi r_0^2 S_e] = S_e$$

Сокращая обе части уравнения на S_e , получаем искомое выражение для нормировочного множителя:

$$b = \frac{\alpha}{\pi r_0^2}, \text{ где } \alpha = 1/t_0.$$

V. Преобразование Лапласа от экспоненциально затухающей временной зависимости

Для временной компоненты функции источника, имеющей вид экспоненциального затухания:

$$f(t) = \exp(-\alpha t),$$

изображение функции $F(p)$ определяется интегральным преобразованием:

$$F(p) = \int_0^{\infty} f(t) e^{-pt} dt = \int_0^{\infty} e^{-\alpha t} e^{-pt} dt$$

Для аналитического вычисления подставим функцию в подынтегральное выражение и объединим показатели экспонент:

$$F(p) = \int_0^{\infty} e^{-(p+\alpha)t} dt$$

Выполняя интегрирование по времени, получаем:

$$F(p) = \left[-\frac{1}{p+\alpha} e^{-(p+\alpha)t} \right]_0^{\infty}$$

При условии $Re(p + \alpha) > 0$, что соответствует области сходимости интеграла Лапласа, значение на верхнем пределе стремится к нулю. Таким образом, окончательно имеем:

$$F(p) = 0 - \left(-\frac{1}{p + \alpha} e^0 \right) = \frac{1}{p + \alpha}$$

VI. Преобразование Ханкеля от источника пучков БТИ гауссова вида

$$D(r) = \exp\left(-\frac{r^2}{r_0^2}\right).$$

Образ функции источника $\tilde{D}(s)$ в пространстве Ханкеля нулевого порядка определяется следующим интегральным выражением:

$$\tilde{D}(s) = \int_0^\infty \exp\left(-\frac{r^2}{r_0^2}\right) J_0(sr) r dr$$

Для аналитического решения данного интеграла обратимся к справочнику Градштейна и Рыжика [124, формула 6.631.4], описывающей интегралы от функций Бесселя с весовым гауссовым множителем:

$$\int_0^\infty x \exp(-\alpha x^2) J_0(\beta x) dx = \frac{1}{2\alpha} \exp\left(-\frac{\beta^2}{4\alpha}\right)$$

Сопоставляя параметры нашего уравнения с табличными значениями, полагаем $\alpha = 1/r_0^2$ и $\beta = s$. После подстановки получаем:

$$\tilde{D}(s) = \frac{1}{2(1/r_0^2)} \exp\left(-\frac{s^2}{4(1/r_0^2)}\right)$$

Выполняя алгебраические преобразования, приходим к итоговому виду образа Ханкеля для гауссова источника:

$$\tilde{D}(s) = \frac{r_0^2}{2} \exp\left(-\frac{r_0^2 s^2}{4}\right)$$

VII. Вычисления нормировочного множителя для пучка ионов Гауссовом виде

Для функции источника $A(r, z, t)$:

$$A(r, z, t) = bS_e \exp\left(-\frac{(t - t_0)^2}{2\sigma_t^2}\right) \exp\left(-\frac{r}{r_0}\right) \mu(z),$$

общее условие нормировки записывается как:

$$\int_0^\infty dt \int_0^\infty 2\pi r A(r, z, t) dr = S_e \mu(z)$$

Разделим переменные и вынесем константы за знаки интегралов:

$$b S_e \mu(z) \left[\int_0^\infty \exp\left(-\frac{(t-t_0)^2}{2\sigma_t^2}\right) dt \right] \left[\int_0^\infty 2\pi r \exp\left(-\frac{r}{r_0}\right) dr \right] = S_e \mu(z)$$

Временной интеграл имеет вид:

$$I_t = \int_0^\infty \exp\left(-\frac{(t-t_0)^2}{2\sigma_t^2}\right) dt$$

Сделаем замену переменной $x = \frac{t-t_0}{\sqrt{2}\sigma_t}$, тогда $dt = \sqrt{2}\sigma_t dx$. Пределы интегрирования изменятся от $-\frac{t_0}{\sqrt{2}\sigma_t}$ до ∞ .

$$I_t = \sqrt{2}\sigma_t \int_{-\frac{t_0}{\sqrt{2}\sigma_t}}^\infty e^{-x^2} dx$$

Используя определение функции ошибок $erf(x)$, этот интеграл равен:

$$I_t = \sqrt{2}\sigma_t \left[\frac{\sqrt{\pi}}{2} \left(1 + erf\left(\frac{t_0}{\sqrt{2}\sigma_t}\right) \right) \right]$$

Согласно тексту статьи [37], при $\sigma_t = t_0$, значение в скобках с учетом коэффициента 0.84134 и множителя $(2\pi)^{1/2}$ дает итоговый вклад по времени в виде $(2\pi)^{1/2} \times 0.84134 \times t_0$.

Радиальный интеграл при $r_m \rightarrow \infty$ имеет вид:

$$I_r = 2\pi \int_0^\infty r \exp\left(-\frac{r}{r_0}\right) dr$$

Применим метод интегрирования по частям ($\int u dv = uv - \int v du$):

Пусть $u = r$, тогда $du = dr$.

Пусть $dv = \exp(-r/r_0) dr$, тогда $v = -r_0 \exp(-r/r_0)$.

$$I_r = 2\pi \left[(-r \cdot r_0 e^{-r/r_0})|_0^\infty + \int_0^\infty r_0 e^{-r/r_0} dr \right]$$

Первое слагаемое равно 0 на обоих пределах.

$$I_r = 2\pi r_0 [-r_0 e^{-r/r_0}]|_0^\infty = 2\pi r_0^2$$

Объединяя результаты интегралов I_t и I_r , получаем:

$$b \cdot (\text{временной вклад}) \cdot (2\pi r_0^2) = 1$$

С учетом специфических коэффициентов, итоговое выражение для b при $r_m \rightarrow \infty$ записывается как [37]: $b = \frac{1}{(2\pi)^{3/2} \times 0.84134 \times r_0^2 \times t_0}$

VIII. Преобразование Лапласа от источник пучков БТИ временная зависимость которого имеет Гауссовой вид

$$a. \quad f(t) = \int_0^\infty \exp \left[1 - \frac{(t-t_0)^2}{2t_0^2} \right].$$

Лаплас образ от этой функции имеет вид

$$\hat{f}(p) = \int_0^\infty \exp \left[-\frac{(t-t_0)^2}{2t_0^2} \right] e^{-pt} dt$$

Имеем [124]:

$$\int_0^\infty e^{-\frac{1}{4\beta}x^2 - \gamma x} dx = \sqrt{\pi\beta} e^{-\beta\gamma^2} [1 - \operatorname{erf}(\gamma\sqrt{\beta})], \quad \operatorname{Re} \beta > 0.$$

Перепишем $\hat{f}(p)$ в следующем виде

$$\begin{aligned} \hat{f}(p) &= \int_0^\infty \exp \left[-\frac{t^2 - 2t_0t + t_0^2}{2t_0^2} - \frac{2t_0^2 pt}{2t_0^2} \right] dt = \\ &= \int_0^\infty \exp \left[-\frac{t^2 - 2t_0t + t_0^2}{2t_0^2} - \frac{2t_0^2 pt}{2t_0^2} \right] dt = \int_0^\infty \exp \left[-\frac{1}{2t_0^2} t^2 - \frac{pt_0 - 1}{t_0} t - \frac{1}{2} \right]. \end{aligned}$$

Ведя обозначения $\beta = t_0^2/2$, $\gamma = (pt_0 - 1)/t_0$, получим

$$\begin{aligned} \hat{f}(p) &= e^{-1/2} \sqrt{\pi \frac{t_0^2}{2}} \exp \left[\frac{t_0^2}{2} \left(\frac{pt_0 - 1}{t_0} \right)^2 \right] \left[1 - \operatorname{erf} \left(\frac{pt_0 - 1}{t_0} \sqrt{\frac{t_0^2}{2}} \right) \right] = \\ &= t_0 \sqrt{\frac{\pi}{2}} \exp \left[\frac{p^2 t_0^2 - 2pt_0 + 1}{2} - \frac{1}{2} \right] \left[1 - \operatorname{erf} \left(\frac{pt_0 - 1}{\sqrt{2}} \right) \right] = \\ &= t_0 \sqrt{\frac{\pi}{2}} \exp \left[\frac{pt_0(pt_0 - 2)}{2} \right] \left[1 - \operatorname{erf} \left(\frac{pt_0 - 1}{\sqrt{2}} \right) \right] = \\ &= t_0 \sqrt{\frac{\pi}{2}} \exp \left[\frac{(pt_0 - 1)^2 - 1}{2} \right] \left[1 - \operatorname{erf} \left(\frac{pt_0 - 1}{\sqrt{2}} \right) \right]. \end{aligned}$$

б. Если возьмём: $t - 5t_0$, то $f(0) \cong 0$. Тогда для $f(t) = \int_0^\infty \exp \left[1 - \frac{(t-5t_0)^2}{2t_0^2} \right] e^{-pt} dt$ получим:

$$\begin{aligned} \hat{f}(p) &= \int_0^\infty \exp \left[-\frac{(t-5t_0)^2}{2t_0^2} \right] e^{-pt} dt = \\ &= \int_0^\infty \exp \left[-\frac{(t-5t_0)^2}{2t_0^2} \right] e^{-pt} dt = t_0 \sqrt{\frac{\pi}{2}} \exp \left[\frac{pt_0(pt_0 - 10)}{2} \right] \left[1 - \operatorname{erf} \left(\frac{pt_0 - 5}{\sqrt{2}} \right) \right]. \end{aligned}$$