

УДК 621.315.592

А.М. УРБАНОВИЧ, О.М. ЧУЙКО

**ТЕРМОАКУСТИЧЕСКИЕ КОЛЕБАНИЯ В КРИСТАЛЛАХ,
ВОЗБУЖДАЕМЫЕ ВЫСОКОЭНЕРГЕТИЧЕСКИМИ
ЗАРЯЖЕННЫМИ ЧАСТИЦАМИ**

We report the results of calculations of acoustical signal from the overheated region near the track formed by a charged particle penetrating the crystal. It is supposed that track represents a sphere where the continuous energy deposition takes place. Temperature fields as well as amplitudes of thermoelastic stresses formed in the crystal have been determined.

Хорошо известно, что при взаимодействии быстрой заряженной частицы с веществом в конце пробега возможна очень быстрая потеря ею своей энергии. Длина пробега частицы между последовательными столкновениями настолько уменьшается, что взаимодействие происходит не с отдельными атомами, а с их группами [1, 2]. Энергия, переданная атомам вещества на последнем этапе, сравнима с энергией активации многих физико-химических процессов. При этом в веществе могут возбуждаться акустические колебания, обусловленные различными механизмами [3-6], среди которых одним из основных является тепловой [7]. Локальные перегревы в области такого теплового пика приводят к возникновению термоупругих напряжений [8], зачастую превышающих прочность материала и существенно влияющих на процессы дефектообразования в кристаллах [9-11]. В работе [12] приводятся результаты исследования радиационных эффектов на поверхности кристаллов Al_2O_3 , облученных ионами висмута, где в качестве возможного механизма образования дефектов (кратеров и пирамидок на поверхности кристалла) рассматриваются термоупругие напряжения. В [13] проанализирована генерация напряжений в треке быстрого иона в SiO_2 в рамках двух моделей: ударных волн и термического пика, а также

проведена оценка возникающих термоупругих напряжений. Область, подвергнутая возмущению, сразу же после каскада соударений заряженной частицы может представлять собой цилиндр некоторого радиуса (трек), где начинаются процессы релаксации энергии возбужденных атомов [11, 14-17]. Но в случаях, когда радиационная длина вещества мишени невелика или большую часть выделяемой в электронную подсистему энергии частица отдает на небольшом последнем участке своего пробега, область соударений можно моделировать сферой радиуса R_0 , на поверхности которой происходит резкое увеличение температуры [9, 18]. Возникающий при этом градиент температур приводит к тепловому расширению среды, в результате чего и генерируется термоакустический сигнал.

В настоящей работе проводится расчет температурного поля, амплитуды акустического сигнала и термоупругих напряжений, возникающих в описанных условиях.

Будем рассматривать бесконечную упругую среду с температурой $T=0$, содержащую сферическую полость радиуса R_0 , внутри которой возникает возмущение, т. е. происходит локальный нагрев. Граничное условие для температуры зададим в виде: $T(R_0, t) = T_0(t)h(t)$, где $T_0(t)$ - функция, описывающая изменение температуры поверхности во времени, а $h(t)$ - единичная функция Хевисайда.

В результате неоднородного нагрева в среде возникают деформации, которые определяются перемещениями U_x, U_y, U_z , а также неустановившиеся температурные напряжения $\sigma_{ij}(i, j=x, y, z)$. В сферических координатах z, φ, θ перемещение U и температура T являются функциями радиуса r и времени t , т. е. $U=U(r, t)$, $T=T(r, t)$, а термонапряжения будут определяться радиальной σ_{rr} и азимутальной (угловой) $\sigma_{\theta\theta}=\sigma_{\varphi\varphi}$ компонентами

$$\begin{aligned} \sigma_{rr} &= \frac{2G}{1-2\mu} \left((1-\mu) \frac{\partial U}{\partial r} + 2\mu \frac{U}{r} - (1+\mu)\alpha T \right), \\ \sigma_{\theta\theta} &= \frac{2G}{1-2\mu} \left(\mu \frac{\partial U}{\partial r} + \frac{U}{r} - (1+\mu)\alpha T \right), \end{aligned} \quad (1)$$

где G - модуль сдвига, μ - параметр Пуассона, α - коэффициент объемного расширения среды; величины $\sigma_{\theta\theta}$ и σ_{rr} связаны между собой соотношением

$$\sigma_{rr} - \sigma_{\theta\theta} = 2G \left(\frac{\partial U}{\partial r} - \frac{U}{r} \right).$$

Уравнения, описывающие температурное поле $T(r, t)$ и амплитуду продольной сферической звуковой волны $U(r, t)$, можно записать в виде [19]

$$\begin{aligned} \frac{\partial T}{\partial t} &= a \left(\frac{\partial^2 T}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial T}{\partial r} \right), \\ \frac{\partial^2 U}{\partial t^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial U}{\partial t} - \frac{2U}{r^2} - \frac{1}{v_3^2} \frac{\partial^2 U}{\partial t^2} &= \alpha \frac{1+\mu}{1-\mu} \frac{\partial T}{\partial r}, \end{aligned} \quad (2)$$

где a - коэффициент температуропроводности среды, v_3 - скорость звука.

Зададим начальные условия для $T(r, t)$ и $U(r, t)$:

$$T(r, 0) = T_0 = \text{const}, \quad U(r, 0) = 0, \quad \left(\frac{\partial U(r, t)}{\partial t} \right)_{t=0} = 0$$

и граничные условия для перемещения U - через значения σ_{rr} на границе $\sigma_{rr}(R_0, t) = 0$, т. е. поверхность полости при $r=R_0$ свободна от радиальных напряжений, а перемещения должны быть конечными величинами при $r \rightarrow \infty$.

Введем следующие обозначения:

$$\xi = \frac{r}{R_0}, \quad \tau = \frac{at}{R_0^2}, \quad \gamma = \frac{a}{v_3 R_0}, \quad u = \frac{1-\mu}{(1+\mu)\alpha T_0 R_0} U, \quad \bar{T} = \frac{T}{T_0},$$

$$\sigma_r = \frac{(1-\mu)\sigma_r}{2(1+\mu)\alpha T_0 G}, \quad \sigma_\theta = \sigma_\theta = \frac{(1-\mu)\sigma_\theta}{2(1+\mu)\alpha T_0 G}.$$

Тогда выражение (1) и уравнения (2) с соответствующими начальными и граничными условиями запишутся в виде:

$$\sigma_r = \frac{1}{1-2\mu} \left((1-\mu) \frac{\partial u}{\partial \xi} + 2\mu \frac{u}{\xi} - (1-\mu) \bar{T} \right),$$

$$\sigma_\theta = \frac{1}{1-2\mu} \left(\mu \frac{\partial u}{\partial \xi} + \frac{u}{\xi} - (1-\mu) \bar{T} \right),$$

$$\frac{\partial \bar{T}}{\partial \tau} = \frac{2}{\xi} \frac{\partial \bar{T}}{\partial \xi} + \frac{\partial^2 \bar{T}}{\partial \xi^2},$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial \xi^2} + \frac{2}{\xi} \frac{\partial u}{\partial \xi} - \frac{2u}{\xi^2} = \gamma^2 \frac{\partial^2 u}{\partial \tau^2} + \frac{\partial \bar{T}}{\partial \xi},$$

$$\bar{T}(\xi, 0) = 1, \quad u(\xi, 0) = 0, \quad \left. \frac{\partial u}{\partial \tau}(\xi, \tau) \right|_{\tau=0} = 0,$$

$$\bar{T}(1, \tau) = h(\tau) = \begin{cases} 0, & -\infty < \tau < 0 \\ 1, & \tau \geq 0 \end{cases}, \quad \left. (1-\mu) \frac{\partial u}{\partial \xi} + 2\mu \frac{u}{\xi} - (1-\mu) \bar{T} \right|_{\xi=1} = 0,$$

$$U(\xi, \tau) \leq \infty, \quad \sigma_r(\xi, \tau) < \infty, \quad \sigma_\theta(\xi, \tau) < \infty \quad \text{при} \quad \xi \rightarrow \infty.$$

Решение задачи (5) - (6) зависит от значения γ и параметра Пуассона μ , величина которого равна отношению поперечной деформации к продольной и заключена между 0 и 0,5. При $\gamma=0$ реализуется так называемый квазистатический режим, переход от которого к динамическому режиму ($\gamma \neq 0$) означает учет ускорений, возникающих в среде под действием термоупругой силы, уравнение для $u(\xi, t)$ в этом случае является волновым.

Задача решалась численно на прямоугольной разностной сетке с постоянными шагами по времени и пространству. На каждом временном слое из полученных систем трехточечных уравнений методом прогонки сначала определялись значения температуры, а затем - перемещения.

Если положить $R_0=2 \div 20$ нм и учесть, что значения коэффициента температуропроводности $a \approx 10^{-4}$ м²/с, а скорость звука $v_3 \approx 10^4$ м/с, то значения γ составят 0,5 ÷ 5. На рис. 1 а приведены кривые зависимости угловых σ_θ и радиальных σ_r термоупругих напряжений от времени τ при $\xi=1$ и $\xi=2$.

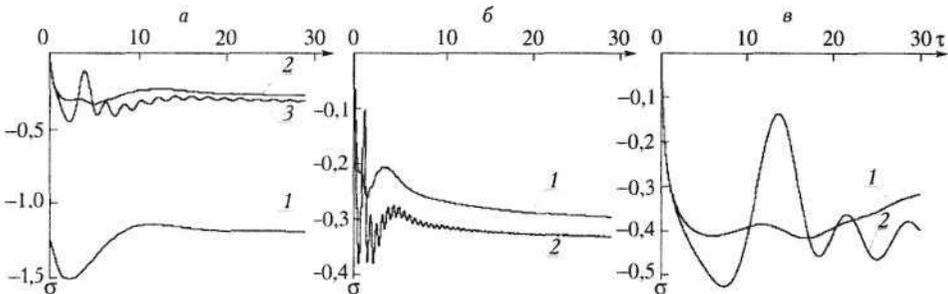


Рис. 1. Зависимость угловых σ_θ и радиальных σ_r термоупругих напряжений от τ при $\bar{T}(R_0, \tau) = h(\tau)$, $\mu=0,1$: а - $\gamma=3$, 1 - σ_θ при $\xi=1$, 2 - σ_r при $\xi=2$; б - $\gamma=1$; в - $\gamma=10$; 1 - σ_θ ; 2 - σ_r при $\xi=2$

В зависимости σ_θ от τ присутствует характерный минимум, после которого σ_θ стремится к своему стационарному значению, причем наибольшее по модулю значение достигает на поверхности сферы ($\xi=1$). Отрицательные значения σ_θ свидетельствуют о напряженном состоянии сжатия. Согласно граничному условию (6) значение $\sigma_r(\xi, \tau)|_{\xi=1}=0$. При $\xi=2$ зависимость σ_r от τ носит осциллирующий характер: в некоторые моменты времени абсолютные значения σ_r могут превышать таковые для σ_θ . По мере увеличения τ величина σ_r также стремится к своему стационарному значению. На рис. 1 б, в приведены зависимости σ_θ и σ_r от τ для различных значений ξ . С увеличением τ период осцилляции и время выхода σ_θ и σ_r на стационарный режим возрастают.

Предположение о постоянстве температуры на сфере радиуса R_0 реализуется для небольших значений времени. С увеличением времени температура будет уменьшаться за счет передачи энергии решетке. Предположим, что изменение температуры поверхности сферы носит экспоненциальный характер, т. е. $T(t, R_0) = T_0 \exp(-t/t_p)$, где t_p - характерное время уменьшения температуры, по порядку сравнимое со временем «расплывания» энергетического пика [18]. Тогда в обозначениях (3) $\bar{T}(1, \tau) = \exp(-\tau/\tau_p)$, где $\tau_p = at_p / R_0^2$. Если положить $R_0=3,3$ нм, $t_0=2 \cdot 10^{-13}$ м/с, $a=10^{-4}$ м²/с, $v_3=10^4$ м/с, то $\gamma=3$, $\tau_p=2$. На рис. 2 пред-

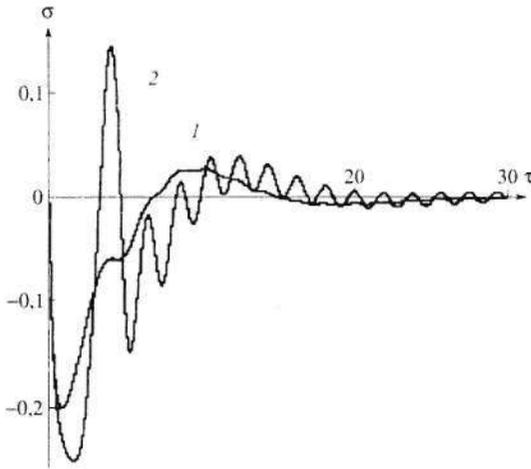


Рис. 2. Зависимость угловых σ_θ (1) и радиальных σ_r (2) термонапряжений от τ при $\bar{T}(R_0, \tau) = \exp(-\tau/\tau_p)$, $\mu=0,1$; $\gamma=3$, $\tau_p=2$, $\xi=2$

всестороннего сжатия для германия.

Температура решетки определяется релаксацией электронных возмущений и ее значение $T_0 \approx 1200$ К. Для Ge коэффициент объемного расширения $\alpha \approx 1,77 \cdot 10^{-5} \text{ K}^{-1}$, а модуль всестороннего сжатия $K=1,4 \cdot 10^{11}$ Па. Тогда из (7) находим, что $\sigma_{\theta 0} \approx 3,0 \sigma_0$ ГПа, $\sigma_{r 0} \approx 3,0 \sigma_r$ ГПа.

Из рис. 1 а видно, что при $r=R_0=3,3$ нм в момент времени $t = \tau R_0^2 / a \approx 3 \cdot 10^{-13}$ с значение $\sigma_\theta \approx -1,55$, а угловые напряжения могут достигать значения $-4,65$ ГПа. При $r=2R_0=6,6$ нм в тот же момент времени $\sigma_\theta \approx -0,32$, а $\sigma_r \approx -0,48$, а значит, $\sigma_{\theta 0} \approx -0,96$ ГПа, $\sigma_{r 0} \approx -1,44$ ГПа, что по порядку совпадает с пределом прочности нелегированных бездислокационных слитков Ge, величина которого $\approx 1,26$ ГПа.

Таким образом, возникающие в динамическом режиме термоупругие напряжения могут превышать критические значения и вносить существенный вклад в образование радиационных дефектов, в частности приводить к возникновению фаз высокого давления, появлению микротрещин и др.

Проведем оценку значений возникающих в веществе термоупругих напряжений:

$$\sigma_{\theta 0} = K\alpha T_0 \sigma_\theta, \quad \sigma_{r 0} = K\alpha T_0 \sigma_r, \quad (7)$$

где $K=2(1+\mu)G/(1-\mu)$ - модуль

Авторы выражают благодарность профессору Ф.Ф. Комарову за обсуждение и критические замечания, способствовавшие улучшению данной работы.

1. Лифшиц И. М. // ДАН СССР. Сер. физ. 1956. Т. 109. С. 1109.
2. Seitz F., Koheler T.S. // Sol. St. Phys. 1956. Vol. 2. № 2. P. 307.
3. White R.M. // J. Appl. Phys. 1963. Vol. 34. № 7. P. 2123.
4. Perry F.C. // Appl. Phys. Lett. 1970. Vol. 17. № 9. P. 408.
5. Калиниченко А.И., Лазурик-Эльцуфин В.Т. // Укр. физ. журн. 1974. Т. 19. № 3. С. 515.
6. Лямшев Л.М., Челноков Б.И. // Радиационная акустика / Под ред. Л.М. Лямшева. М., 1987. С. 8.
7. Воловик В.Д., Калиниченко А.И., Кобизской В.И., Лазурик-Эльцуфин В.Т. // Письма в ЖЭТФ. 1974. Т. 19. В. 2. С. 135.
8. Калиниченко А.И., Лазурик В.Т. // ЖЭТФ. 1973. Т. 65. № 6 (12). С. 2364.
9. Давыдов А.А., Калиниченко А.И. // Атомная энергия. 1982. Т. 53. № 3. С. 186.
10. Комаров А.А. // Вестн. Белорус. ун-та. Сер. 1. 1997. № 1. С. 15.
11. Комаров Ф.Ф. // УФН. 2003. Т. 173. № 12. С. 1287.
12. Скуратов В.А., Ефимов А.Е., Загорский Д.Л. // ФТТ. 2002. Т. 44. № 1. С. 165.
13. Klaumunzer S. // Nucl. Instr. and Meth. Phys. Res. B. 2004. Vol. 225. P. 136.
14. Лифшиц И.М., Каганов М.И., Танатаров Л.В. // Атомная энергия. 1959. Т. 6. № 4. С. 391.
15. Новиков А.П., Урбанович А.И., Нгуен Ван Конг // Вестн. Белорус. ун-та. Сер. 1. 1991. № 3. С. 18.
16. Урбанович А.И., Новиков А.П., Нгуен Ван Конг // Там же. 1992. № 2. С. 7.
17. Давыдов А.А., Калиниченко А.И. // Проблемы ядерной физики и космических лучей. 1986. Т. 26. № 1. С. 60.
18. Радиационная акустика. М., 1987.
19. Паркус Г. // Неуставившиеся температурные напряжения. М., 1963.

Поступила в редакцию 12.04.05.

Александр Иосифович Урбанович - кандидат физико-математических наук, доцент кафедры математической физики.

Ольга Михайловна Чуйко - магистрант кафедры математической физики. Научный руководитель - А.И. Урбанович.

$$\begin{aligned} &g_{\pi}(r)=\text{const} \\ \varepsilon'(r) - \varepsilon(r)[\ln \psi(r)]' &= 2\varepsilon^2(r), \end{aligned} \quad (1)$$