

Математическое моделирование энерговыведения и релаксации в центральной области трека

Б.Ф. Костенко, Я. Прибиш, В.П. Филинова
Лаборатория информационных технологий, ОИЯИ

Abstract

Exact calculations of energy deposition in the vicinity of the trajectory of accelerated ions are very important for development of theoretical models in radiation chemistry, radiobiology, micro- and nanoelectronics, as well as for description of ultra-modern ion track technologies. In particular, mathematical experiments show that magnitude of tracks in high- T_c superconductors (specially created for the critical current increase) are completely determined by energy deposition at $r < 1$ nm. In spite of the great practical significance of the problem, modern theoretical models predict very different, up to a factor of 10, values of the density of energy in the central part of the track. At first sight, this theoretical uncertainty could be eliminated with the help of appealing to the experiment. Indeed, the detailed dose measurements in the Rossi-type tissue-equivalent gas were carried out in BNL (USA). A difficult experimental task of determination of dose at small distances was resolved due to the smallness of the gas density, ρ_g , which is much smaller than the tissue density, $\rho_t \approx 1$ g/cm³. The thickness of a layer of the tissue of about 1 nm corresponds to a layer thickness ~ 1 cm with the same amount of the matter in the gas, and these distances turned out to be easy of experimental access. Our estimations, however, show that these data should be treated with a caution. The fact is that, the energy liberated in the central part of the track is able to spread swiftly through electrons into the outside region. This means that, in the above mentioned experiments, some integral characteristic determined by the energy deposition at all points r less than the radial distance of a detector, r_D , was measured instead of the local energy-release. In other words, the radial distribution of dose should still be found using the obtained experimental data by means of resolving the inverse problem of energy relaxation.

In condensed state, the relaxation processes run in a similar (although not in the identical) way, and their description represents a separate problem. In the present report, a mathematical model and results of calculations, with taking into account the relaxation processes, for energy deposition in the central part of the track of accelerated ions in liquid water are presented. It is shown that the relaxation during the time of energy deposition, $t_0 \sim 10^{-14}$ s, essentially modifies the energy-release description.

1 Введение

Точные расчеты энерговыведения в области, непосредственно прилегающей к траектории ускоренного иона, имеют большое значение для построения теоретических моделей в радиохимии, радиобиологии, микро- и нанoeлектронике, а также при описании ультрасовременных трековых технологий. В частности, математические эксперименты показывают, что размеры латентных треков в высокотемпературных сверхпроводниках, которые создаются специально для увеличения критического тока, *полностью* определяются энерговыведением в области $r < 1$ нм. Несмотря на

большую практическую значимость данной задачи, имеющиеся теоретические модели предсказывают здесь существенно различные значения плотности энерговыделения. Так, даже наиболее употребительные сейчас модели расходятся по своим предсказанием в этой области *на порядок* (см. обзор [1]).

На первый взгляд кажется, что данную теоретическую неопределенность можно устранить непосредственным обращением к эксперименту. Действительно, в радиобиологии проводились экспериментальные исследования дозы, выделившейся в газе, по своему атомному составу близкому к составу живой ткани (см. ссылки в работе [2]). Достаточно трудную с экспериментальной точки зрения задачу измерения дозы на малых расстояниях удалось решить, благодаря тому, что плотность газа, ρ_g , существенно меньше плотности ткани, ρ_t . Поэтому толщине тормозящего слоя $\rho_t r$ в ткани при $r < 1$ нм отвечали существенно большие расстояния в газе, $r > 1$ см, которые оказались вполне доступными экспериментальному исследованию. Проведенные нами оценки, однако, показывают, что к полученным таким образом данным следует относиться с большой осторожностью. Дело в том, что теплота, поступившая в центральную часть трека, способна стремительно распространяться по электронным степеням свободы в наружную область, так что в экспериментах такого типа измеряется не энерговыделение в точке расположения детектора, r_D , а некоторая интегральная характеристика, определяемая дозой во всех точках $r < r_D$. Иными словами, истинное пространственное распределение дозы в центральной части трека еще только должно быть найдено из имеющихся экспериментальных данных путем решения обратной задачи тепловой релаксации (с учетом конкретных условий постановки экспериментов).

В конденсированных средах релаксационные процессы в центре трека протекают хотя и похожим, но не тождественным, образом. Фактически, их описание представляет собой отдельную задачу, которой и посвящена данная работа. Далее будут представлены результаты математического моделирования процессов тепловой релаксации в центральной области трека для ионов, распространяющихся в жидкой воде. Эксперименты с газообразными мишенями будут подробно обсуждаться в наших последующих публикациях.

2 Основные предположения модели

Состояние электронной подсистемы будем описывать уравнением теплопроводности

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

Здесь T_e , C_e , K_e — температура, теплоемкость и теплопроводность электронного газа, $\rho = 1$ г/см³ — плотность воды. В отличие от наших предыдущих работ [3] – [5], взаимодействие электронов с атомной подсистемой учитывать не будем. Это обусловлено тем обстоятельством, что за время энерговыделения в центральной области трека $t_0 \sim 10^{-15}$ с (время ударной ионизации) сколь-нибудь существенной энергопередачи в атомную систему не происходит, поскольку длительность процессов электрон-атомной релаксации больше или порядка 10^{-13} с.

Член $q(r, t)$ в уравнении (1) будем описывать в рамках пространственно-временной модели энерговыделения, описанной в работе [6] с дополнительным учетом продол-

жительности ударной ионизации. Для центральной области трека такая поправка сводится к домножению источника на множитель $(1 - \exp(-t/t_0))$.

Температуропроводность электронного газа, $D_e = K_e/\rho C_e$, будем согласно [7] считать близкой к $1 \text{ см}^2/\text{с}$ в области сильной ионизации и равной нулю для не ионизированного вещества с учетом того, что вода — диэлектрик. Таким образом, параметры основного уравнения нашей модели будут полностью определены, если известна теплоемкость электронов $C_e(T_e)$.

3 Теплоемкость электронов в плазме, образующейся в центральной области трека

Предполагая локальную компенсацию электрического заряда электронов и ионов, среднее число электронов с энергией E будем описывать распределением Ферми для невзаимодействующих частиц:

$$\langle N \rangle = \frac{1}{e^{(E-\mu(T))/K_B T} + 1} \quad , \quad (2)$$

где T — температура электронов, K_B — постоянная Больцмана, $\mu(T)$ — химический потенциал электронов, находящихся в электрическом поле ионов. Будем также считать, что энергии связи электронов в молекуле воды совпадают с потенциалами ионизации отдельных атомов, входящих в ее состав, за исключением одного наиболее слабосвязанного электрона, для которого берется потенциал ионизации молекулы воды (12.6 эВ). При таком подходе учитывается зависимость энергии связи электронов от степени ионизации атома, которая возрастает с увеличением степени ионизации), а также тот факт, что при заданной температуре электронов наиболее вероятен отрыв электрона с наименьшей энергией связи.

Из того, что при $T = 0$ все электроны находятся в связанном состоянии следует, что значение химического потенциала μ при нулевой температуре равно наибольшей энергии связи электрона в атомах. Выделяя в выражении для химического потенциала эту величину отдельным слагаемым,

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

выражению нетрудно придать вид

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

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

соответственно для связанных и свободных состояний. Здесь

$$\epsilon_i = \mu(0) - E_i$$

— энергия связи, отвечающая i -му электронному уровню,

$$\epsilon_k = \frac{p_k^2}{2m}$$

— энергия свободного электрона. Очевидно, что полученные формулы позволяют трактовать химический потенциал как своего рода потенциальную яму, при выходе из которой электрон затрачивает энергию, равную энергии связи. Зависящая от температуры поправка к постоянной части химического потенциала $\Delta\mu(T)$ может быть найдена из условия сохранения полного числа электронов

$$\sum_i (1 - \langle N_{i,b} \rangle) = \sum_k \langle N_{k,f} \rangle, \quad (3)$$

где суммирование выполняется с учетом кратности вхождения атома данного сорта в молекулу H_2O . Заменяя обычным образом сумму по состояниям свободных электронов интегралом (здесь v — объем, приходящийся на одну молекулу вещества)

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

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

$$\sum_i n_i \left(1 - \frac{1}{e^{-(\epsilon_i+\Delta\mu)/K_B T} + 1} \right) = \text{const } T^{3/2} \int_0^\infty \frac{\sqrt{z}dz}{e^{z-\Delta\mu/K_B T} + 1}, \quad (4)$$

где n_i — кратность вхождения атомов в формулу вещества.

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

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

где суммирование выполняется по всем связанным состояниям.

На рис. 1 представлены результаты численных расчетов теплоемкости электронов, выполненные в рамках рассматриваемой модели, а также ее приближенная аппроксимация, используемая в дальнейшем. Зависимость “доза-температура электронов”, полезная при пересчете значений дозы в жидкой воде в температуру электронов на стадии, предшествующей электрон-атомной релаксации, показана на рис. 2.

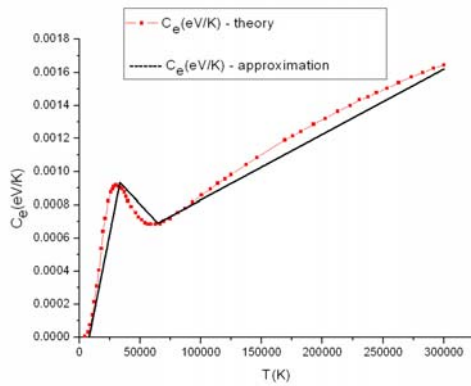


Рис. 1: Теплоемкость электронов для воды, находящейся в жидкой фазе, отнесенная к одной молекуле [8]

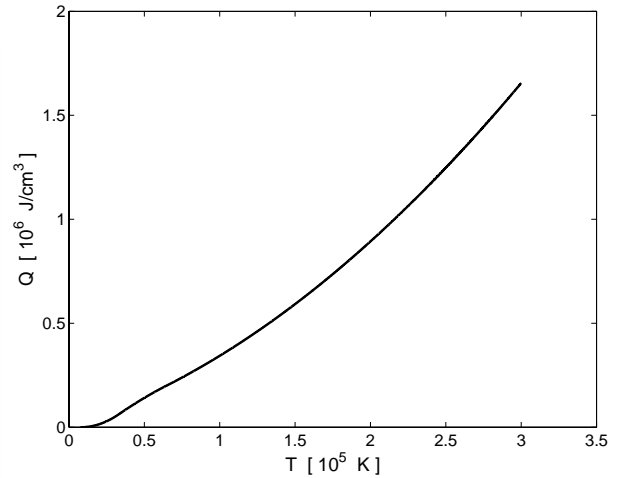


Рис. 2: Зависимость “доза-температура электронов”

4 Результаты расчетов и выводы

На рис. 3 показана временная эволюция распределения температуры электронов вплоть до $t = 10^{-14}$ с, когда энерговыделение в центральной области уже полностью закончилось. На рис. 4 показаны результаты расчетов дозы в центральной части трека к моменту полного окончания процессов энерговыделения. Для сравнения также приведена плотность энерговыделения без учета процессов тепловой релаксации в электронной подсистеме. Видно, что релаксационные процессы существенно влияют на динамику процесса энерговыделения [9].

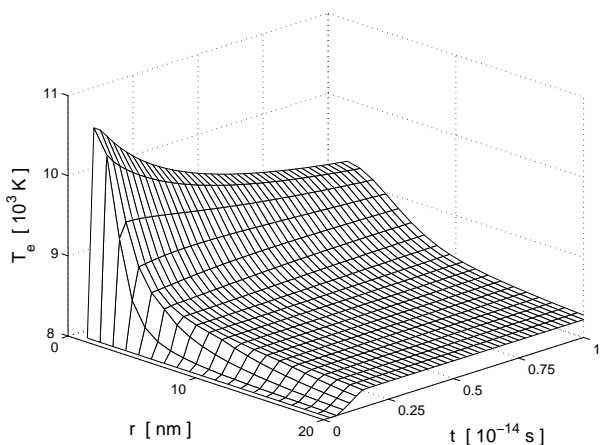


Рис. 3: Распределение температуры электронов вокруг трека иона ${}^6\text{C}$ с энергией 10 МэВ/а.е.м. в жидкой воде

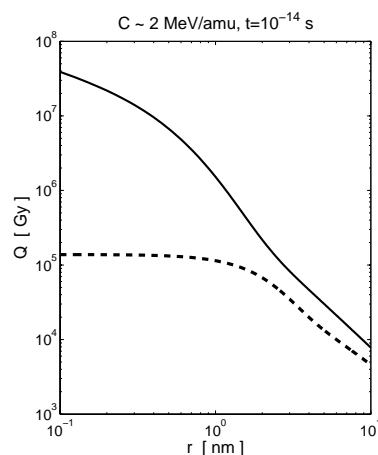


Рис. 4: Плотность энерговыделения с (пунктирная кривая) и без (сплошная кривая) учета процесса тепловой релаксации

Список литературы

- [1] O. Fageeha, J.Howard and R.C. Block, J. Appl. Phys. 1993, V. 75, p. 2317.
- [2] M.P.R. Waligorski, R.N. Hamm, R. Katz. Nucl. Tracks Radiat. Meas. 1986, V. 11, p. 309.
- [3] Goncharov I.N., Kostenko B.F., Philinova V.P. Phys. Lett. A. 2001. V.288. p.111.
- [4] В. Kostenko, J. Pribish. Вестник РУДН, Серия Прикладная и компьютерная математика. 2005. Т. 4. с. 55.
- [5] В.Ф. Kostenko, J. Pribis, I.N. Goncharov. Письма в ЭЧАЯ. 2006. Т. 3. с. 31.
- [6] В.С. Барашенков. Химия высоких энергий. 1994. Т. 28. с. 229.
- [7] И.А. Баранов, Ю.В. Мартыненко, С.О. Цепелевич, Ю.Н. Явлинский. УФН, 1988, Т. 156. с. 477.
- [8] Айрян Э.А., Костенко Б.Ф., Федоров А.В. Расчет химических потенциалов и теплоемкости электронов в области сильной ионизации. Сообщение ОИЯИ Р14-98-235, Дубна, 1998.
- [9] XLIII Всерос. конф. по проблемам математики, информатики, физики и химии, Москва, РУДН, 23-27 апреля 2007 г., с.41.