

**НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ЦЕНТР  
КУРЧАТОВСКИЙ ИНСТИТУТ**

На правах рукописи



Терехин Павел Николаевич

**КОЛИЧЕСТВЕННАЯ МОДЕЛЬ ВОЗБУЖДЕНИЯ МАТЕРИАЛОВ В  
ТРЕКАХ БЫСТРЫХ ТЯЖЕЛЫХ ИОНОВ**

Специальность: 01.04.07

«Физика конденсированного состояния»

Диссертация  
на соискание учёной степени  
кандидата физико-математических наук

Научный руководитель:  
к.ф.-м.н. Волков А.Е.

Москва – 2014

## Содержание

Введение.....	4
<b>Глава 1. Обзор современного состояния исследований.....</b>	<b>13</b>
1.1. Обзор моделей возбуждения материалов в треках БТИ.....	13
1.2. Современный этап исследований.....	23
Заключение по Главе 1.....	27
Выводы из Главы 1.....	28
<b>Глава 2. Формализм динамического структурного фактора.....</b>	<b>29</b>
2.1. Скорость электрон-решёточного обмена энергией в рамках формализма ДСФ.....	29
2.2. Связь пространственно-временной корреляционной функция и ДСФ.....	33
2.3. ДСФ мультикомпонентной системы .....	34
2.4. Предельные случаи динамики системы рассеивателей в формализме ДСФ (мгновенное приближение).....	36
2.5. Предельные случаи динамики системы рассеивателей в формализме ДСФ (гармоническое приближение).....	37
2.6. Молекулярно-динамическая модель расчёта ДСФ.....	39
2.7. Тестирование модели расчёта ДСФ.....	41
Заключение по Главе 2.....	43
Выводы из Главы 2.....	44
<b>Глава 3. Микроскопическая количественная модель возбуждения материалов в треках БТИ.....</b>	<b>45</b>
3.1. Базовые положения модели .....	45
3.2. Монте-Карло модель возбуждения электронной подсистемы материала....	47
3.3. Пространственное распространение электронов после окончания ионизационных каскадов.....	50
3.4. Передача энергии в решётку мишени в результате ее взаимодействия с релаксирующими горячими электронами в треке БТИ.....	53

Заключение по Главе 3.....	56
Выводы из Главы 3.....	57
<b>Глава 4. Применение разработанной модели возбуждения трека БТИ к материалам, допускающим экспериментальную проверку (Al, LiF, оливин (Mg<sub>2</sub>SiO<sub>4</sub>)).....</b>	<b>58</b>
4.1. Эффект реализации различных предельных случаев динамической реакции решётки на скорость электрон-решётчного обмена энергией (Al).....	58
4.2. Зависимость скорости электрон-решётчного обмена энергией от температуры электронов (Al).....	66
4.3. Нагрев решётки LiF в результате ее взаимодействия с релаксирующими горячими электронами в треке БТИ.....	69
4.4. Нагрев решётки оливина (Mg <sub>2</sub> SiO <sub>4</sub> ) в результате ее взаимодействия с релаксирующими горячими электронами в треке БТИ.....	75
Заключение по Главе 4.....	80
Выводы из Главы 4.....	82
<b>Заключение.....</b>	<b>83</b>
<b>Обозначения.....</b>	<b>86</b>
<b>Список использованной литературы.....</b>	<b>87</b>

### Актуальность темы исследования

Быстрые тяжелые ионы (БТИ,  $E > 1$  МэВ/нуклон,  $M > 20m_p$ ,  $m_p$  – масса протона) теряют большую часть своей энергии в твердом теле на возбуждение его электронной подсистемы ( $> 95\%$ , 5 - 40 КэВ/нм) [1]. Последующая релаксация электронного возбуждения, сопровождающаяся передачей энергии и импульса в решетку, может вызывать необычные структурно-фазовые изменения в нанометрической окрестности траектории иона (трек БТИ), что может служить основой для технологических применений.

Знание физики эффектов, связанных с прохождением БТИ, важно для оценки радиационной стойкости материалов к облучению осколками деления (ОД). Длина пробега БТИ ( $\sim 10 - 100$  мкм) дает возможность производить структурные изменения в слоистых и структурированных наноразмерных системах [1-5]. Облучение БТИ стимулирует образование цепочек нанокластеров и/или изменение формы нанокластеров, содержащихся в облучаемой матрице [1-5]. Отрабатываются основанные на облучении БТИ технологии производства нанопроволок и нанотрубок, в том числе интегрированных в материал [1-5]. Промышленное производство полимерных фильтров базируется на облучении БТИ и последующем травлении полимерных пленок [6]. Ионно-лучевая терапия применяется для лечения онкологических заболеваний [7]. Исследуются задачи модификации генетического материала пучками БТИ [8].

Отработка технологий наноразмерных структурно-фазовых превращений, стимулированных облучением БТИ, невозможна без создания модели, предоставляющей количественную информацию о параметрах экстремально возбужденного материала в треке, поскольку экспериментальная фиксация этих параметров чрезвычайно затруднена [1,2,9].

Эта задача представляет и фундаментальный интерес, так как пространственные и временные масштабы кинетики возбуждения и релаксации материала в окрестности траектории БТИ настолько малы ( $\sim 10$  нм, 1 фс - 1 пс), а интенсивность возбуждения настолько велика, что применение для описания этой кинетики моделей, основанных на предположении локального термодинамического равновесия и использующих макроскопические параметры и подходы, слабо обосновано. То есть эта энергично развивающаяся современная область исследований имеет дело с экстремальными состояниями вещества, для исследования которых необходимо применять сложные, зачастую нетрадиционные, подходы.

Для экспериментальных исследований треков БТИ требуется использование мощных ускорителей, число которых во всем мире измеряется единицами. Поскольку подобные эксперименты очень дороги, то для их эффективной реализации крайне важно проводить планирование с учетом понимания тех процессов, которые происходят в облучаемых материалах. Это обеспечивает тесную связь экспериментальных исследований с теорией.

### **Цели и задачи работы**

1) Построение основанной на общих фундаментальных принципах микроскопической количественной модели возбуждения материалов в наноразмерных треках БТИ, учитывающей возможность реализации различных предельных случаев пространственно-временной корреляции в динамике атомов на пикосекундном временном масштабе кинетики возбуждения и начальной стадии релаксации решетки в треке.

2) Исследование эффекта реализации различных предельных случаев пространственно-временной корреляции в динамике атомов решётки на скорость передачи энергии и импульса в ионную подсистему материала в зависимости от параметров возбужденного электронного ансамбля в треке БТИ.

3) Оценка стимулированного релаксацией электронной подсистемы нагрева решётки диэлектриков в треке БТИ на примере материалов, допускающих ясную экспериментальную проверку.

### **Результаты работы, выносимые на защиту**

1. Микроскопическая, основанная на формализме динамического структурного фактора (ДСФ), количественная модель, описывающая возбуждение решетки в результате релаксации электронной подсистемы в треке БТИ.

2. Численный алгоритм, реализующий построенную модель.

3. Зависимость скорости передачи энергии и импульса в решетку от температуры электронного ансамбля. Сравнение электрон-решёточных факторов скорости передачи энергии ( $A_1$ ), используемых в моделях других авторов [10-12], и фактора скорости передачи энергии, полученного в представляемой модели.

4. Результаты применения разработанной модели к системам, допускающим экспериментальную проверку. Величины параметров, характеризующих возбужденное состояние решетки LiF и оливина ( $Mg_2SiO_4$ ) в треке БТИ. Сравнение электрон-решёточных факторов скорости передачи энергии (LiF): используемого в модели двухтемпературной термической вспышки (ТВ) и полученного в представляемой модели.

### **Научная новизна работы состоит в:**

- разработке количественной модели, основанной на формализме ДСФ, описывающей кинетику передачи энергии и импульса от релаксирующего ансамбля делокализованных электронов в решётку в треке БТИ и автоматически реализующей различные предельные случаи динамической реакции решётки на вносимое возбуждение;

- разработке численного алгоритма: Молекулярно Динамическая (МД) программа расчета ДСФ, молекулярно-кинетический метод расчета пространственного распространения электронов, расчет скорости передачи энергии от электронов в решетку – для реализации предложенной модели и

определения пространственно-временных распределений величин параметров, формирующих движущие силы и условия протекания структурно-фазовых превращений в треках БТИ в различных материалах (пространственно-временные распределения избыточной энергии и импульса, температуры электронов и решётки);

- исследовании эффекта реализации различных предельных случаев пространственно-временной корреляции в динамике атомов на зависимость скорости передачи энергии в ионную подсистему мишени от температуры электронного ансамбля;
- сравнении результатов применения разработанного подхода с экспериментальными данными (LiF, оливин ( $Mg_2SiO_4$ )).

### Достоверность

Применимость разработанной модели для описания кинетики возбуждения материалов в треках БТИ обосновывается тем, что:

1. Модель базируется на общих фундаментальных принципах и использует минимальное количество упрощающих приближений.
2. В расчетах применяются МД алгоритмы и потенциалы, которые широко используются сообществом.
3. Низкотемпературная часть зависимости скорости передачи энергии в решётку алюминия от величины электронной температуры согласуется с расчетами других авторов [10-12] и экспериментальными результатами [13-15].
4. Полученный небольшой нагрев треков БТИ в LiF согласуется с экспериментальными оценками [16] и не может быть объяснен моделью термической вспышки. Рассчитанный уровень возбуждения решётки коррелирует с наблюдаемыми структурными изменениями, которые видны в оливине [17] и не обнаруживаются в LiF [16].

### **Теоретическая и практическая значимость работы**

- Построена количественная модель, описывающая возбуждение материала в наноразмерном треке БТИ. Разработан численный алгоритм, реализующий эту модель. Исследовано влияние различных предельных случаев пространственно-временной корреляции в динамике атомов на величину скорости передачи энергии от возбужденной электронной подсистемы в решётку в треке БТИ.
- Представляемая модель и результаты имеют фундаментальное значение для описания кинетики возникновения экстремального состояния вещества при релаксации его возбужденной электронной подсистемы.
- Получаемые в результате применения модели параметры возбужденного материала могут быть использованы в качестве начальных условий в моделях наноразмерных структурно-фазовых превращений, вызываемых релаксацией трековой области.

### **Методология и методы исследования**

В работе использовались аналитические методы исследований и самостоятельно разработанные компьютерные программы, использующие алгоритмы и межатомные потенциалы, которые широко применяются научным сообществом. Для описания кинетики и определения параметров возбужденной электронной подсистемы в треке БТИ применялась ранее разработанная и оттестированная на экспериментах Монте-Карло (МК) модель [18-20]. Для расчета ДСФ и исследования релаксации возбужденной атомной подсистемы материалов применялся метод Молекулярной Динамики.

### **Апробация работы**

Материалы, представленные в диссертации, были доложены на следующих конференциях и школах:

- 16-я Международная Конференция по Физике высоко заряженных ионов (НСИ-2012) (2 – 7 сентября 2012 г., г. Гейдельберг, Германия);



- Конференция Европейского Общества по Исследованию Материалов (E-MRS 2012) (17 – 21 сентября 2012 г., г. Варшава, Польша);
- 25-я Международная Конференция по атомным столкновениям в твердых телах (ICACS-25), (21 – 25 октября 2012 г., г. Киото, Япония);
- 10-ая Курчатовская молодежная научная школа (23 – 26 октября 2012 г., г. Москва, Россия);
- 17-я Международная Конференция по радиационным эффектам в диэлектриках (REI-2013) (30 июня – 5 июля 2013 г., г. Хельсинки, Финляндия);
- 28-я Международная Конференция по физике фотонных, электронных и атомных столкновений (ICREAS-28) (24 – 30 июля 2013 г., г. Ланьчжоу, Китай);
- 11-ая Курчатовская молодежная научная школа (12 – 15 ноября 2013 г., г. Москва, Россия).

#### **Личный вклад автора**

- Выполнена аналитическая проработка основанной на формализме ДСФ модели обмена энергией и импульсом между электронной и ионной подсистемами твердого тела в треке БТИ.
  - Разработан численный алгоритм, объединяющий МК модель кинетики возбуждения электронной подсистемы и оригинальную МД модель кинетики возбуждения атомной подсистемы материала в треке БТИ.
  - Проведен расчет скорости передачи энергии от ансамбля делокализованных электронов в ионную подсистему материала (Al). Исследовано влияние различных предельных случаев пространственно-временной корреляции в динамике атомов решётки на зависимость этой скорости от электронной температуры.
  - Определены временные зависимости возникающих радиальных распределений избыточного импульса и энергии решетки в нанометрической окрестности траектории БТИ в материалах, допускающих экспериментальную проверку (LiF, оливин ( $Mg_2SiO_4$ )).

### Структура и объем работы

Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения и списка цитируемой литературы. Работа содержит 97 страниц, включает 15 рисунков, 5 таблиц. Список цитированной литературы содержит 89 наименований.

В первой главе дается обзор модельных представлений формирования треков БТИ, и показано современное состояние исследований по этой тематике.

Во второй главе обосновывается применение формализма ДСФ для построения сечений взаимодействия релаксирующей электронной подсистемы с динамически и пространственно коррелированными атомами решетки в треке БТИ.

Третья глава посвящена описанию построенной микроскопической количественной модели возбуждения материалов в треках БТИ. Резкое различие в характерных временах кинетики электронной и ионной подсистем позволило разделить модель на блоки, работающие на разных временных интервалах кинетики возбуждения трека БТИ.

В четвертой главе приводятся примеры применения разработанной модели к описанию возбуждения различных материалов (LiF, оливин ( $Mg_2SiO_4$ )) в треках БТИ. На примере алюминия исследовано влияние электронной температуры на реализацию различных предельных случаев скорости электрон-решётчного обмена энергией, связанной с различной динамической корреляцией атомов решётки. LiF и оливин использовались для демонстрации возможного различия в нагреве материалов в треке БТИ.

### Публикации автора

По материалам диссертации опубликовано 10 печатных работ, из них 3 статьи в рецензируемых журналах, рекомендованных ВАК Минобрнауки РФ.

1. Gorbunov, S.A. The microscopic model of material excitation in swift heavy ion tracks / S.A. Gorbunov, N.A. Medvedev, **P.N. Terekhin** et al. // Physica Status Solidi C. – 2013. – № 10. – P. 697.

2. Gorbunov, S.A. Combined model of the material excitation and relaxation in swift heavy ion tracks / S.A. Gorbunov, **P.N. Terekhin**, N.A. Medvedev et al. // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B. – 2013. – № 315. – P. 173.
3. Gorbunov, S.A. Excitation and relaxation of olivine after swift heavy ion impact / S.A. Gorbunov, N.A. Medvedev, R.A. Rymzhanov et al. // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B. – 2014. – № 326. – P. 163.
4. **Terekhin, P.N.** DSF based model of lattice excitation at the late stage of relaxation of the electronic subsystem in a swift heavy ion track / **P.N. Terekhin**, S.A. Gorbunov, N.A. Medvedev et al. // 16th International Conference on the Physics of Highly Charged Ions, Heidelberg, Germany, 2-7 September, Book of Abstracts – 2012. – P. 187.
5. Gorbunov S.A. The microscopic model of material excitation in swift heavy ion tracks / S.A. Gorbunov, **P.N. Terekhin**, R.A. Rymzhanov et al. // European Material Research Society Fall Meeting, Warsaw, Poland, 17 – 21 September, Book of Abstracts – 2012. – P. L-VIII3.
6. Gorbunov S.A. Microscopic Model of Material Excitation in Swift Heavy Ion Tracks / S.A. Gorbunov, **P.N. Terekhin**, R.A. Rymzhanov et al. // 25th International Conference on Atomic Collisions in Solids, Kyoto, Japan, 21-25 October, Book of Abstracts – 2012. – P. 111.
7. Gorbunov S.A. Dynamic Structure Factor Based Approach for Electron-Lattice Coupling in Swift Heavy Ion Tracks / S.A. Gorbunov, **P.N. Terekhin**, N.A. Medvedev et al. // 25th International Conference on Atomic Collisions in Solids, Kyoto, Japan, 21-25 October, Book of Abstracts – 2012. – P. 112.

8. Горбунов, С.А. Количественная модель возбуждения материалов в наноразмерных треках быстрых тяжелых ионов, тормозящихся в режиме электронных потерь энергии / С.А. Горбунов, **П.Н. Терехин**, Н.А. Медведев, А.Е. Волков // X Курчатовская молодёжная научная школа, Москва, Россия, 23-26 октября, Сборник аннотаций работ – 2012. – Р. 225.
9. Rymzhanov R.A. Microscopic model of excitation of in swift heavy ion tracks in insulators / R.A. Rymzhanov, A.E. Volkov, **P.N. Terekhin** et al. // 17th International Conference on Radiation Effects in Insulators, Helsinki, Finland, June 30 – July 5, Book of Abstracts – 2013. – Р. PA-82.
10. **Терехин, П.Н.** Модель возникновения и релаксации экстремального состояния материалов, возникающего в наноразмерных треках БТИ / **П.Н. Терехин**, А.Е. Волков // XI Курчатовская молодёжная научная школа, Москва, Россия, 12-15 ноября, Сборник аннотаций работ – 2013. – Р. 251.

## Глава 1. Обзор современного состояния исследований

### 1.1. Обзор моделей возбуждения материалов в треках БТИ

Быстрый тяжёлый ион (БТИ,  $E > 1$  МэВ/нуклон,  $M > 20m_p$ ,  $m_p$  – масса протона) теряет основную часть энергии (более 95%, 10-50 кэВ/нм) на возбуждение электронной подсистемы мишени в нанометрической окрестности своей траектории (трек БТИ) [1]. Даже передача небольшой части избыточной энергии электронной подсистемы в ионную подсистему материала может приводить к заметному возбуждению решётки в треке БТИ. Последующая релаксация этого возбуждения может стимулировать наноразмерные структурно-фазовые изменения вдоль траектории иона, формируя видимый трек БТИ.

Интерес к трекам БТИ в значительной степени стимулировался проблемами ядерной энергетики. Устойчивость к облучению БТИ / осколками деления (ОД) может быть критическим параметром, определяющим радиационную стойкость материалов. Описание формирования треков БТИ необходимо также для разработки детекторов частиц тяжёлых ионов и ОД.

БТИ могут использоваться при наноструктурировании материалов (образование внутри облучаемого материала нанопроволок, нанотрубок, цепочек нанокластеров, соединений между нанослоями и т.д.). Облучение БТИ используется при массовом производстве полимерных фильтров, в ионно-лучевой терапии. Облучение БТИ применяется и в медицине для лечения онкологических заболеваний.

Трек альфа-частицы впервые был сфотографирован в камере Вильсона более ста лет назад [21]. Это доказало, что заряженная частица вблизи своей траектории изменяет физические и химические свойства среды.

Впервые треки осколка деления урана (тяжёлого иона) в электронный микроскоп наблюдали в слюде 1959 году Силк и Барнес [1]. Это были тонкие протяжённые дефектные участки диаметром  $\sim 3$  нм. Впоследствии оказалось, что в большинстве облучённых материалов под действием пучка электронов из электронного микроскопа такие треки быстро исчезают. Поэтому они получили название «латентных» (скрытых) треков.

Для выявления этих треков в 1962 году Прайс и Уокер впервые применили метод химического травления [22]. Область латентного трека обладает более высокой химической активностью, чем неповреждённые участки, в силу наличия в ней дефектов и упругих напряжений. Поэтому скорость её травления выше, чем окружающей матрицы. После травления треки становились видны в оптический микроскоп. Эта методика, основанная на химическом травлении, широко используется для выявления треков БТИ и исследования явлений, сопутствующих прохождению БТИ.

Фундаментальный интерес к процессам, происходящим в треках БТИ, связан, прежде всего, с необычной, с «макроскопической» точки зрения, кинетикой возникновения и релаксации области сильно неравновесного материала. Эта кинетика стартует с состояния, в котором электронная подсистема материала достигает экстремальных уровней возбуждения в нанометрической окрестности траектории иона, а атомная подсистема при этом остаётся невозмущённой. Такое состояние материала существует очень короткое время ( $\sim 10$  фс) и не наблюдается при иных способах воздействия. Пространственные ( $\sim 10$  нм) и временные (1 фс - 1 пс) масштабы кинетики возбуждения и релаксации материала в треке БТИ настолько малы, а интенсивность возбуждения настолько велика, что применение привычных макроскопических моделей для описания этой кинетики оказывается затруднительным.

Экстремальность интенсивности и пространственно-временных масштабов кинетики возбуждения трека БТИ приводит к резкой зависимости этой кинетики от реализующихся начальных параметров возбуждения. Это может проявляться в существенной зависимости наблюдаемых структурно-фазовых изменений от

параметров облучения. Типичными наблюдаемыми реализациями этого эффекта являются: (а) пороговые по  $Se$  (электронные потери энергии) явления [1,3], (б) резкая зависимость структурных изменений в треке БТИ от температуры облучения (щелочно-галоидные кристаллы) [3,16], (в) «эффект скорости», когда при одинаковых электронных потерях, производимые ионом структурные изменения резко зависят от скорости налетающей частицы. Особенно ярко этот эффект проявляется для энергий иона симметрично расположенных относительно Брэгговского пика электронных потерь энергии налетающего иона [3].

Модели образования треков БТИ впервые появились в работах, исследующих радиационную стойкость воды и водных растворов. Первую модель образования трека в воде предложил Яффе в 1913 году [2]. В ней трек частицы представлялся в виде ионной колонны. Начальное радиальное распределение ионов каждого знака в такой колонне предполагалось гауссовским, и диффузия ионов от оси трека рассматривалась с учётом их рекомбинации. Процесс одновременных диффузии и рекомбинации описывался нелинейным дифференциальным уравнением. Это уравнение имеет аналитическое решение в предположении малого влияния процессов рекомбинации по сравнению с процессами диффузии на пространственное распространение ионов от траектории налетающей частицы. В этом случае в каждый момент времени форму радиального распределения ионов можно полагать гауссовой, даже при условии, что концентрация ионов уменьшается со временем. Эта модель «предписанной диффузии» долгое время использовалась для вычисления параметров, определяющих химические превращения в облучаемой среде.

Работая в области радиационной биологии, Ли (1934 г.) [2] предположил, что ионизационные каскады, вызываемые неупругими столкновениями налетающей быстрой частицы, приводят к образованию локализованных областей сильно ионизированного состояния вещества (содержащих две или более ионных пары). Такие области он назвал роями. В рое положительно заряженные ионы разнесены на расстояние 3 нм, а ионы разного знака – на расстояние 15 нм. Подобное разделение ионов разного знака обусловлено тем, что отрицательные ионы

образовывались выбитым из центра трековой области на большое расстояние быстрым дельта-электроном.

При небольших энергиях налетающей частицы эти рои в среде были пространственно разделены, а при значительных энергиях (примерно 12 МэВ для альфа-частицы) рои перекрывались, образуя ионную колонну.

Платцман [23] развил эти представления, полагая, что некоторые выбиваемые электроны удаляются на значительное расстояние от трека, и нейтрализуется не сразу, а оказываются в окружении поляризованных молекул воды. Эта модель предсказала существование наблюдавшегося впоследствии экспериментально гидратированного электрона.

В основу более поздних моделей взаимодействия БТИ с веществом [2] были положены линейные потери энергии (ЛПЭ) налетающей частицы - энергии, передаваемой материалу мишени, на единице длины траектории частицы. Кинетика химических и физических процессов связывалась с ЛПЭ [2].

ЛПЭ ионов можно разделить на высокие ( $> 100$  эВ/нм), характерные для тяжёлых многозарядных ионов, средние (1-100 эВ/нм), характерные для лёгких ионов, например, альфа-частиц, и низкие ( $< 1$  эВ/нм), которыми обладают, как правило, более лёгкие частицы.

Модель треков ионов, реализующих средние ЛПЭ, предложили Мозумдер, Четтерджи и Маги [2,24]. Они предположили, что возбужденную область в воде (трек иона) можно разделить на цилиндрически симметричное сплошное ядро (сердцевину), расположенное вблизи от траектории пролетающего иона (около 1 нм) и образующее «ионную колонну», и оболочку (пинамбу) радиусом около 5 нм, расположенную вокруг этого ядра.

В процессе ионизации материала в треке БТИ электроны получают различную энергию, которая зависит, например, от прицельного параметра рассеяния иона. В процессах образования ядра трека в модели Четтерджи играли роль образованные в результате первичной ионизации низкоэнергетичные электроны. Эти электроны теряли свою энергию, не покидая ядра трека. Пинамбура же ограничивалась областью распространения быстрых первично выбитых электронов, вылетающих



из ядра на большое расстояние. В силу малой концентрации быстрых электронов, вылетающих из ядра трека, их траектории практически не перекрывались в случаях ионов реализующих средние ЛПЭ.

Ионы с высокими значениями ЛПЭ производят гораздо большее количество высокоэнергитичных электронов, и плотность быстрых первично выбитых электронов, покидающих ядро трека, такова, что происходит перекрытие их траекторий в пенамбре [24]. Таким образом, в этом случае оболочка так же, как и ядро, становится гомогенной, что не выполнялось для ионов со средними ЛПЭ. Отметим, что это обстоятельство не учитывалось в первоначальных работах по расчету радиального распределения избыточной энергии в подобных моделях треков частиц.

К настоящему времени сформировались следующие «устойчивые» группы моделей возникновения треков БТИ.

Первая группа основывается на предположении о разлёте / сильном возбуждении высокоионизованных атомов центральной части трека в результате кулоновского взаимодействия («кулоновский взрыв»). Налетающий БТИ создаёт в центре трека область с высокой концентрацией положительно заряженных ионов. Вследствие кулоновского расталкивания ионы приобретают значительную кинетическую энергию, последующая релаксация которой может приводить к возникновению повреждений решётки и полей напряжений в решётке.

В частности, результатом такого подхода стал критерий образования трека, основанный на предположении, что напряжение, создаваемое кулоновским расталкиванием ионов, должно быть больше механической прочности мишени.

Однако было показано, что в металлах механизм «кулоновского взрыва» не реализуется из-за экранировки положительно заряженной области за времена порядка характерного плазмонного времени  $\omega_p^{-1} \approx 10^{-16}$  с [4,25,26]. В диэлектриках ионизованные электроны под действием кулоновского притяжения возвращаются в положительно заряженную область значительно быстрее, чем ионы успеют набрать энергию, необходимую для разлета / сильного возбуждения [26].

Вторая группа моделей основывается на предположении возникновения ударной волны [27,28] в окрестности траектории БТИ, когда из-за резкого нагрева трековой области образуется граница разрыва значений термодинамических величин в среде. Если набираемая при этом скорость атомов превышает скорость звука в материале, то образуется ударная волна. Недостатком этих моделей является множество используемых макроскопических приближений. Например, критическим является использование закона Фурье для описания потока тепла, который применим в случае, если пространственный масштаб неоднородностей превышает длину свободного пробега частиц, а временной – время столкновения между частицами. Эти условия могут не выполняться в наноразмерном треке БТИ.

В работе [29] удалось объяснить спектры испускаемых фотонов при БТИ облучении алюминия в предположении возникновения квазинейтрального плазменного шнура вблизи траектории иона.

Для описания формирования треков в диэлектриках применяют и экситонную модель (Ито и Стоунхэмом [1,30,31]). После пролёта иона в треке создаётся плотная среда электрон-дырочных пар, что стимулирует возникновение экситонов. Последующая эволюция скопления экситонов происходит по следующим механизмам: а) рекомбинация электронов и дырок, б) диффузия экситонов от центра трека, обеспечивающая перенос энергии из его центра, в) распад экситонов с формированием дефектов и упругих напряжений в решётке в случае, если энергия экситона превосходит энергию создания этих дефектов в материале (например, LiF, NaCl).

Экситонная модель в дальнейшем была применена для количественных оценок Явлинским [32], который предполагал, что отличие между металлами и диэлектриками при формировании треков состоит в том, что в последних электрон может распространяться из центра трека только в составе электрон-дырочной пары.

Наиболее популярной моделью формирования трека БТИ в настоящее время остаётся модель двухтемпературной термической вспышки (ТВ) [33-37],

поскольку структурно-фазовые изменения обычно связываются с изменением температуры мишени. В ней предполагается, что различие в температурах ансамбля делокализованных электронов и ионной подсистемы создает движущую силу передачи части избыточной энергии электронного ансамбля в решётку. Возникающий в результате взаимодействия с горячими электронами нагрев решётки является причиной структурно-фазовых изменений в треке БТИ. Как правило, этот обмен энергией описывается константой электрон-фононного взаимодействия [36]. Считается, что пространственное распространение тепла в подсистемах подчиняется законам термодиффузии.

Модель ТВ используют и при описании образования треков БТИ в диэлектриках [36,37], поскольку из-за ионизации мишени в области трека возникает значительная концентрация делокализованных электронов.

Однако принципиальным оказывается вопрос о применимости базовых концепций, лежащих в основе модели термической вспышки, для описания возбуждения решетки в треке БТИ. Макроскопические предположения локального теплового равновесия, термодиффузии, электрон-фононного взаимодействия оказываются слабо обоснованными при описании характеризуемой нанометрическими и фемто-пикосекундными масштабами кинетики возбуждения трека БТИ (подробнее о недостатках модели ТВ см. ниже).

Следует отметить, что большое количество предлагаемых моделей трекообразования связано как с разнообразием процессов, происходящих в треке, так и с особенностями формирования трека в конкретных материалах. В работе [38] отмечается, что в подходах, образующих каждую из групп моделей, нет противоречия, и стадии ионизации, кулоновского взрыва и последующей термической релаксации должны следовать друг за другом. Однако обобщающей модели, основанной на последовательном объединении этих стадий, до сих пор предложено не было.

Поскольку не существует подобной общей модели образования треков тяжёлых ионов, то в научном сообществе отсутствует единое мнение по поводу

механизмов формирования наблюдаемых структурно-фазовых превращений в подобных системах [1-5].

Как уже отмечалось, для построения пространственно-временного источника избыточной энергии, передаваемой в решётку в треке БТИ, наиболее распространённой моделью, допускающей аналитическое описание, в настоящее время остаётся модель термической вспышки [1,36]. Полученные при помощи неё начальные параметры, характеризующие термализованное возбужденное состояние материала, могут затем органично использоваться при создании моделей структурно-фазовых превращений в треке, например, в простейшем случае, плавления или аморфизации решётки. Главным преимуществом модели ТВ является ее простота, возможность получения аналитического решения и использование при описании структурно-фазовых изменений отработанных методов, основанных на температурном подходе.

В наиболее общем виде модель термической вспышки формулируется следующим образом. Предполагается, что в цилиндрически симметричном случае уравнения, описывающие распространение тепла в электронной и атомной подсистемах материала, а также обмен энергией между делокализованными электронами и решёткой, имеют следующий вид (термодиффузия с источником) [1]:

$$C_e(T_e) \frac{\partial T_e}{\partial t} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r K_e(T_e) \frac{\partial T_e}{\partial r} \right) - g(T_e - T_i) + A(r, t), \quad (1.1)$$

$$C_i(T_i) \frac{\partial T_i}{\partial t} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r K_i(T_i) \frac{\partial T_i}{\partial r} \right) + g(T_e - T_i). \quad (1.2)$$

Здесь  $C_e$ ,  $C_i$  - удельные теплоёмкости электронной и ионной подсистем соответственно,  $T_e$ ,  $T_i$  - температуры электронной и ионной подсистем,  $K_e$ ,  $K_i$  - удельные теплопроводности,  $g$  - константа электрон-фононного взаимодействия,  $A(r, t)$  - пространственно-временной источник, связанный с энергией, передаваемой налетающим ионом в электронную подсистему материала.

Параметры электронной подсистемы в модели ТВ задаются в приближении газа свободных электронов. Теплопроводность электронного газа оценивают из экспериментальных данных по термодиффузии [1] в металлах, в которых состояние электронов близко к идеальному газу. Теплоёмкость и теплопроводность решётки обычно определяют из «макроскопических» экспериментов.

Задачу вычисления скорости обмена энергией между возбуждёнными электронами и решёткой материала в рамках электрон-фононного механизма в 1955 году рассмотрели Гинзбург и Шабанский [33]. Затем в 1956 году этот результат на случай произвольных температур обобщили Каганов, Лифшиц, Танатаров [34]. Среди параметров материала, определяющих эту скорость, были температура Дебая, текущая температура решётки, время электрон-фононной релаксации. Жигилей в своей работе [10] учитывал при расчёте скорости электрон-фононного обмена также зависимость этой скорости от температуры электронного газа и плотности состояний (дисперсионного закона) электронов в конкретных материалах.

Принципиальные проблемы [39-43] применимости ТВ к описанию возбуждения материала в треке БТИ связаны, прежде всего, с субпикосекундными временами кинетики релаксации электронной подсистемы в треке БТИ.

Характерным примером является проблема использования электрон-фононного механизма для описания передачи энергии и импульса от возбуждённой электронной к ионной подсистеме в треке БТИ в твёрдых телах [10,11,44,45]. Действительно, из-за малого времени остывания электронной подсистемы ( $\sim 10^{-14}$  с) основная часть этой энергии передаётся за времена меньшие времена атомных осцилляций, и, следовательно, времени возникновения фононов [39]. Поэтому адекватно описывающая передачу энергии модель должна учитывать возможность реализации различных предельных случаев динамической корреляции атомов решётки при её взаимодействии с неравновесным электронным ансамблем на фемто-пикосекундных временных масштабах релаксации электронной подсистемы в наноразмерном треке БТИ.

Другой пример, связанный с проблемой введения температуры решётки мишени, проиллюстрирован в работе [43], где было показано, что время термализации возбужденной решётки в треке БТИ больше (сравнимо) времени ее возбуждения. Это затрудняет применение концепции локального теплового равновесия, составляющей основу модели термической вспышки, применяемой для описания возбуждения материала в треке [33,34,46-49].

Следует отметить, что скорость электрон-решёточного взаимодействия будет, очевидно, зависеть от локальных температур электронов, решётки; концентраций электронов, которые будут различны в различные моменты времени и в разных областях трека [40-42].

Также показано [43], что адекватное описание возбуждения решётки материала в треке БТИ требует учета конечной скорости пространственного распространения этого возбуждения (в простейшей интерпретации – движение фронта возбуждения со скоростью звука). Это невозможно сделать в рамках модели термодиффузии (параболическое уравнение теплопроводности), обычно используемого в модели ТВ [33,34,46-49]. В работе [43] для описания движения фронта возбуждения решетки в треке БТИ в рамках модели ТВ предлагается использовать волновое уравнение теплопереноса (уравнение Каттанео).

Модель ТВ не учитывает и баллистического характера разлёта быстрых первично выбитых электронов.

Кроме этого, результаты недавних работ [19,20] указывают на то, что значительная часть энергии БТИ (50 - 80 %) высаживается в дырочную подсистему материала, кинетика которой не учитывается в «классической» модели ТВ. Таким образом, релаксация ансамбля валентных дырок может существенно повлиять на процесс формирования трека БТИ.

Эти трудности приводят к использованию множества подгоночных параметров в реализациях модели ТВ. Так, характеристики наблюдаемых в экспериментах треков (размер и др.) используются в качестве подгоночных, например, при задании в модели ТВ скорости выделения энергии налетающего иона в электронную подсистему трека и при задании плотности энергии образующихся

электронов [1,36,46]. В [36] время электрон-фононной релаксации выбиралось как подгоночный параметр при задании используемой в модели константы электрон-фононного взаимодействия.

Фактически активное использование сообществом подгоночных параметров указывает на то, что модель термической вспышки не позволяет до проведения калибровочных экспериментов, которые требуют значительных организационных и финансовых затрат, предсказать параметры треков произвольных ионов в различных материалах.

Яркой экспериментальной демонстрацией проблем применимости модели ТВ является наблюдение возникновения стабильных только при криогенных температурах центров окраски при низкотемпературных облучениях БТИ щелочно-галлоидных кристаллов [16]. Наличие данных центров окраски указывает на низкий (кратковременный) нагрев решётки этих кристаллов в наноразмерной окрестности траектории БТИ, что не согласуется с выводами модели ТВ [36] о возможном достижении температур плавления-испарения в треках LiF.

## **1.2. Современный этап исследований**

Прогресс в области экспериментальных исследований стимулирует появление новых технологий с применением процессов, инициированных БТИ облучением материалов. Это требует создания количественных моделей формирования треков БТИ, основанных на наиболее фундаментальных принципах.

На современном этапе исследований построение подобной адекватной количественной модели, описывающей все стадии возбуждения материала в треке БТИ, является ключевым моментом для описания кинетики трека. При этом

выбор базовых предположений, формирующих основу расчетов, является принципиальной фундаментальной задачей.

В середине прошлого века, когда описанные выше модели только создавались, реализовать количественную микроскопическую модель трека было невозможно. Получение количественных результатов и оценок было ограничено, в первую очередь, приближениями, в рамках которых возможно использовать аналитические методы и выражения.

Переход на качественно новый уровень исследований связан с развитием высокопроизводительных вычислительных средств, что позволило создавать компьютерные модели процессов, в которых заложены лишь самые базовые физические принципы. Компьютерное моделирование позволяет избежать многих приближений аналитических моделей, а также принять во внимание процессы, которые не учитывались в аналитических решениях.

Рассмотрим несколько примеров разработанных в последние годы моделей возникновения и релаксации электронного возбуждения.

Для модели термической вспышки использование численных методов даёт возможность задавать более сложные зависимости используемых в уравнениях теплопроводности параметров, к примеру, зависимость электрон-фононного фактора от температуры и концентрации ионов, зависимости удельных теплоемкостей электронной и решёточной подсистем от температур электронов и решетки, соответственно, то есть описывать динамику системы в условиях, при которых аналитическое решение получить невозможно. Примером использования подобных зависимостей является работа [36].

Авторы работы [50] 2008 года моделировали испарение атомов с поверхности при облучении материала быстрыми тяжёлыми ионами. Предполагалось, что интенсивная ионизация приповерхностных атомов мишени налетающим БТИ приводит к вылету этих атомов из материала. Было использовано три различных модели зарядовой нейтрализации иона (за время  $< 10$  фс) и сопутствующего выделения энергии в атомную подсистему мишени. Для моделирования последующего вылета атомов с поверхности мишени применялся метод



классической молекулярной динамики. Взаимодействие этих атомов описывалось эффективным потенциалом, учитывающим особенности строения и свойств исследуемого материала.

В 2009 году была представлена количественная компьютерная модель, основанная на плазменном приближении кинетики возбуждения и релаксации электронной подсистемы в треках БТИ [29]. Для демонстрации ее реализации в качестве модельной системы был выбран алюминий. В этой работе были рассчитаны и учтены сечения множественной ионизации, что невозможно без использования компьютерного моделирования. Для описания релаксации электронного ансамбля применялись методы классической молекулярной динамики.

В 2010 году в работе [51] для оценки устойчивости решётки щелочно-галогидного кристалла при появлении в ней сильного электронного возбуждения был применён метод *ab-initio* («из первых принципов») в сочетании с МД. В рамках этой модели материал рассматривался как совокупность валентных электронов и ионных остовов. Для моделирования поведения ионных остовов использовались классические уравнения движения, поскольку их квантовые свойства, в силу малости длины волны де Бройля, проявляются слабо. Для описания валентных электронов кристалла применялась теорема функционала плотности, и численно решались одночастичные уравнения Шредингера. Было показано, что уже при относительно небольшом возбуждении электронной подсистемы стабильность решётки исследуемого кристалла резко снижалась.

Однако следует иметь в виду, что время расчётов растёт экспоненциально при увеличении числа моделируемых атомов [52], поэтому реализация этого метода при расчёте на 64-ёх процессорном вычислительном кластере поведения 500 атомов на протяжении нескольких пикосекунд (характерное время релаксации первичного возбуждения материала в треке) требует более одной недели. Иначе говоря, использование этого метода для описания всех стадий образования трека во всём объёме материала с нынешним уровнем развития вычислительных средств, оказывается невозможным.

С использованием современных вычислительных средств методами Монте-Карло [18-20] можно описать кинетику возбуждения электронной подсистемы материала в треке БТИ и определить угловые и радиальные распределения плотности и плотности энергий первично выбитых электронов. В настоящее время расчёт подобных распределений доступен для любого материала и любого пролетающего иона и в стандартных программных пакетах [53,54]. Однако эти программы не лишены модельных предположений, которые могут существенно влиять на кинетику возбужденной электронной подсистемы, например, используется приближение бинарных столкновений, то есть не учитывается коллективная реакция электронной подсистемы на вносимое возбуждение.

Таким образом, для успешной реализации компьютерного моделирования физических процессов важно, с одной стороны, использовать наименьшее количество приближений, а с другой - создать модель, использование которой потребует адекватного количества времени и вычислительных ресурсов.

Разработанная в 2010-2014 годах количественная модель возбуждения и релаксации материала в треке быстрых тяжёлых ионов [40-42] представлена в диссертации. В ней применяется соединение упомянутой выше ранее разработанной и отгестированной на экспериментах Монте-Карло модели возбуждения электронной подсистемы трека [18-20] и модели классической молекулярной динамики, описывающей кинетику релаксации атомов мишени на вносимое возбуждение. Модель учитывает особенности коллективной реакции электронной и решёточной подсистем в процессе их взаимодействия и обмена энергией в треке БТИ.

## Заключение по Главе 1

В Главе 1 рассмотрены основные этапы развития представлений о треках быстрых тяжёлых ионов, тормозящихся в режиме электронных потерь энергии, в конденсированных средах. Показана актуальность фундаментальных и экспериментальных исследований, направленных на изучение лежащих в основе формирования треков тяжёлых ионов процессов и механизмов.

Приведены примеры и краткие описания моделей, применявшихся на различных этапах изучения этой проблемы. Обсуждены преимущества и недостатки этих моделей.

Указана принципиальная необходимость построения адекватной количественной модели возбуждения решётки при ее взаимодействии с релаксирующей электронной подсистемой в треке БТИ, без которой невозможно построение реалистичных моделей структурно-фазовых изменений в материалах, облучаемых БТИ.

Рассмотрены основные современные численные и аналитические методы, применяющиеся для изучения механизмов трекообразования.

Определены ключевые проблемы, требующие решения, и обоснована мотивация выбора целей исследований, представленных в диссертации.

## Выводы из Главы 1

На основании выполненного в настоящей главе анализа современного состояния исследования трекообразования и процессов, происходящих в треках БТИ, можно сделать следующие выводы:

1. Макроскопические подходы испытывают принципиальные трудности при описании кинетики возбуждения электронной и решёточной подсистем в треке БТИ.

2. Существующие модели возбуждения материалов в треке БТИ не учитывают всех особенностей кинетики трека БТИ, описывая лишь отдельные этапы его формирования, не сводя их в «единое целое». Эти модели не являются количественными, что затрудняет их применение для описания кинетики структурно-фазовых изменений в треке.

3. Требуется создание новой микроскопической количественной модели возбуждения материалов в треках БТИ, построенной на наиболее общих фундаментальных принципах, не использующей подгоночных параметров и описывающей кинетику этого возбуждения во взаимосвязи её различных стадий.

4. Принимая во внимание трудности, которые испытывают существующие модели трекообразования, наиболее целесообразным представляется описание возбуждения и релаксации трека БТИ при помощи численной микроскопической модели. Это позволит (а) получить количественный результат; (б) обойти проблемы с использованием на фемто-пикосекундных временных и нанометрических пространственных масштабах приближений, основывающихся на макроскопических предположениях.

## Глава 2. Формализм динамического структурного фактора

### 2.1. Скорость электрон-решётчного обмена энергией в рамках формализма ДСФ

Возбуждение материала в нанометрической окрестности траектории налетающего БТИ стартует с сильного возбуждения его электронной подсистемы. Релаксация электронного ансамбля, возбужденного прохождением БТИ, приводит к передачи энергии и импульса в решётку мишени. Кинетическая энергия типичного электрона в этом ансамбле больше потенциальной энергии его взаимодействия как с другими электронами, так и с атомами решетки. В этом случае для описания подобной электронной подсистемы может быть использовано одноэлектронное приближение, а величина переданной в единицу времени энергии от электронной подсистемы в атомную подсистему материала определяется через момент одноэлектронного кинетического уравнения:

$$Q_{e-i} = \frac{dE}{dt} = \sum_{k_i} E_{k_i} \frac{df_{k_i}}{dt}. \quad (2.1)$$

Здесь  $E_{k_i}$  - энергия налетающего электрона,  $f_{k_i}$  - одночастичная функция распределения электронов.

Уравнение на функцию распределения электронов в случае их взаимодействия с динамически и пространственно меняющейся системой атомов имеет следующий вид [55]:

$$\frac{df_{k_i}}{dt} = \sum_{k_f} W_{k_f \rightarrow k_i} f_{k_f} (1 - f_{k_i}) - W_{k_i \rightarrow k_f} f_{k_i} (1 - f_{k_f}). \quad (2.2)$$

где  $W_{\mathbf{k}_i \rightarrow \mathbf{k}_f}$  - вероятность перехода электрона из начального состояния в конечное. В (2.2) учтено, что на электроны действует запрет Паули, поэтому на вероятности перехода было наложено дополнительное условие  $W_{\mathbf{k}_f \rightarrow \mathbf{k}_i} \rightarrow W_{\mathbf{k}_f \rightarrow \mathbf{k}_i} (1 - f_{\mathbf{k}_i})$ .

Нас будут интересовать все возможные переходы рассеивающегося электрона из начального состояния в конечное независимо от конечного состояния системы рассеивателей. Поскольку конкретное начальное состояние системы рассеивателей неизвестно, то искомая вероятность будет усредняться по этим состояниям:

$$W_{\mathbf{k}_i \rightarrow \mathbf{k}_f} = \sum_i \gamma_i \sum_f W_{\mathbf{k}_i, i \rightarrow \mathbf{k}_f, f}. \quad (2.3)$$

Здесь  $\gamma_i$  - статистический вес начального состояния системы рассеивателей,  $W_{\mathbf{k}_i, i \rightarrow \mathbf{k}_f, f}$  - вероятность перехода системы «электрон+решётка» из начального состояния в конечное.

Вероятность перехода  $W_{\mathbf{k}_i, i \rightarrow \mathbf{k}_f, f}$  в первом порядке по теории возмущений имеет вид:

$$W_{\mathbf{k}_i, i \rightarrow \mathbf{k}_f, f} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle f | \langle \mathbf{k}_f | \hat{U}_{\text{int}} | \mathbf{k}_i \rangle | i \rangle|^2 \delta(E_{\mathbf{k}_f} + E_f - E_{\mathbf{k}_i} - E_i), \quad (2.4)$$

где  $\hbar$  - постоянная Планка,  $\hat{U}_{\text{int}}$  - оператор возмущения (потенциальная энергия взаимодействия электрона с системой рассеивающих атомов решётки),  $|\mathbf{k}_i\rangle$  и  $|\mathbf{k}_f\rangle$  - волновые функции начального и конечного состояния электрона,  $|i\rangle$  и  $|f\rangle$  - волновые функции начального и конечного состояния решетки,  $\delta(E_{\mathbf{k}_f} + E_f - E_{\mathbf{k}_i} - E_i)$  - дельта-функция Дирака.

В качестве полной линейно-независимой системы в пространстве собственных функций невозмущённого гамильтониана ансамбля делокализованных электронов выбирается базис плоских волн в координатном представлении:

$$\langle \mathbf{r} | \mathbf{k} \rangle = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}, \quad (2.5)$$

где объём, на который нормирована волновая функция,  $V$  есть объём рассматриваемой ячейки, в которой расположены рассеиватели. Координатное представление удобно и тем, что в нём задан вид оператора возмущения  $\hat{U}_{\text{int}}$ .

Если считать взаимодействие между рассеивателями и рассеивающейся частицей парным [56], то

$$\hat{U}_{\text{int}} = \sum_{n=1}^N \hat{U}(\mathbf{r} - \hat{\mathbf{R}}_n), \quad (2.6)$$

где  $N$  – число рассеивателей,  $\hat{\mathbf{R}}_n$  – оператор координаты  $n$ -того атома решётки.

Выражения (2.3) - (2.6) приводят к факторизации вероятности перехода на множители, один из которых определяется рассеянием частицы на индивидуальном рассеивателе, а другой является динамическим структурным фактором рассеивающей системы [57]:

$$W_{\mathbf{k}_i \rightarrow \mathbf{k}_f} = \frac{2\pi}{\hbar^2 V^2} |\tilde{U}(\mathbf{k})|^2 \int \frac{dt}{2\pi} e^{i(E_{k_f} - E_{k_i})\frac{t}{\hbar}} \left\langle \sum_{m,n=1}^N e^{-i\mathbf{k}(\hat{\mathbf{R}}_n(0) - \hat{\mathbf{R}}_m(t))} \right\rangle = \frac{2\pi}{\hbar^2 V^2} |\tilde{U}(\mathbf{k})|^2 S(\mathbf{k}, \omega), \quad (2.7)$$

где  $\tilde{U}(\mathbf{k})$  – пространственный фурье образ потенциальной энергии взаимодействия электрона и иона решетки,  $\mathbf{k} = \mathbf{k}_i - \mathbf{k}_f$  – изменение волнового вектора налетающей частицы,  $\hbar\omega = E_{k_i} - E_{k_f}$  – изменение энергии налетающей частицы.

Динамический структурный фактор (ДСФ «заряд-заряд»)

$$S(\mathbf{k}, \omega) = \int \frac{dt}{2\pi} e^{-i\omega t} \left\langle \sum_{i,j=1}^N e^{-i\mathbf{k}(\hat{\mathbf{R}}_i(0) - \hat{\mathbf{R}}_j(t))} \right\rangle, \quad (2.8)$$

учитывает коллективную реакцию ансамбля рассеивателей на вносимое возбуждение ( $N$  – количество рассеивающих атомов). Треугольные скобки означают квантовомеханическое и статистическое усреднение по ансамблю собственных состояний невозмущённого гамильтониана рассеивающей системы  $|\psi_\xi\rangle$ , то есть  $\langle(\dots)\rangle = \sum_{\xi} \gamma_{\xi} \cdot \langle\psi_{\xi} |(\dots)|\psi_{\xi}\rangle$ , где  $\gamma_{\xi}$  – статистический вес  $|\psi_{\xi}\rangle$ -того состояния.

Следует учесть, что в действительности функция распределения системы атомов является многочастичной и зависит от  $3N$  координат и импульсов. Однако

нас интересуют лишь переходы между состояниями с различной энергией, поэтому суммирование по всем конфигурациям с одной и той же энергией подразумевается и здесь не выписывается, так как не влияет на результат.

В классическом приближении ДСФ оказывается симметричным относительно обращения времени,  $S_{cl}(\mathbf{k}, \omega) = S_{cl}(-\mathbf{k}, -\omega)$ . Однако ДСФ системы рассеивателей в общем случае несимметричен. Это хорошо видно в равновесном случае ( $T_e = T_i$ ), когда для удовлетворения принципа детального баланса требуется выполнение условия [58 – 61]:

$$S(\mathbf{k}, \omega) = \exp\left(\frac{\hbar\omega}{k_B T_i}\right) S(-\mathbf{k}, -\omega), \quad (2.9)$$

где  $T_i$  - температура ионной подсистемы. В классическом приближении  $\hbar \rightarrow 0$  и множитель  $\exp\left(\frac{\hbar\omega}{k_B T_i}\right) \rightarrow 1$ .

Поэтому для учёта асимметрии (2.9) для классического приближения ДСФ вводится поправочный множитель [58 – 61]:

$$S(\mathbf{k}, \omega) = \frac{\frac{\hbar\omega}{k_B T_i}}{1 - \exp\left(-\frac{\hbar\omega}{k_B T_i}\right)} S_{classic}(\mathbf{k}, \omega) \quad (2.10)$$

С учётом (2.7) выражение (2.2) можно переписать в виде:

$$\frac{df_{\mathbf{k}_i}}{dt} = \frac{2\pi}{\hbar^2 V^2} \sum_{\mathbf{k}_f} |\tilde{U}(\mathbf{k})|^2 \left\{ f_{\mathbf{k}_f} (1 - f_{\mathbf{k}_i}) S(-\mathbf{k}, -\omega) - f_{\mathbf{k}_i} (1 - f_{\mathbf{k}_f}) S(\mathbf{k}, \omega) \right\}. \quad (2.11)$$

Скорость электрон-решётчного обмена энергией  $Q_{e-i} = -\frac{dE}{dt}$  (2.1) будет иметь

вид:

$$Q_{e-i} = -\sum_{\mathbf{k}_i} E_{\mathbf{k}_i} \frac{df_{\mathbf{k}_i}}{dt} = -\frac{2\pi}{\hbar^2 V^2} \sum_{\mathbf{k}_i, \mathbf{k}_f} E_{\mathbf{k}_i} |\tilde{U}(\mathbf{k})|^2 \left\{ f_{\mathbf{k}_f} (1 - f_{\mathbf{k}_i}) S(-\mathbf{k}, -\omega) - f_{\mathbf{k}_i} (1 - f_{\mathbf{k}_f}) S(\mathbf{k}, \omega) \right\}. \quad (2.12)$$

Можно упростить выражение (2.12), переходя от суммирования к интегрированию:



$$Q_{e-i} = \frac{4}{(2\pi)^5 \hbar} \int f_{\mathbf{k}_i} (1 - f_{\mathbf{k}_f}) \omega S(\mathbf{k}, \omega) |\tilde{U}(\mathbf{k}_i - \mathbf{k}_f)|^2 d\mathbf{k}_i d\mathbf{k}_f. \quad (2.13)$$

## 2.2. Связь пространственно-временной корреляционной функции и ДСФ

Динамический структурный фактор  $S(\mathbf{k}, \omega)$  выражается через пространственно-временную парную корреляционную функцию  $G(\mathbf{r}, t)$  системы рассеивателей [56]:

$$S(\mathbf{k}, \omega) = \frac{N}{2\pi} \int dt d\mathbf{r} e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)} G(\mathbf{r}, t), \quad (2.14)$$

где  $G(\mathbf{r}, t)$  имеет следующий вид [56]:

$$G(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{N} \left\langle \sum_{i,j=1}^N \int d\mathbf{r}' \delta(\mathbf{r} + \hat{\mathbf{R}}_i(0) - \mathbf{r}') \delta(\mathbf{r}' - \hat{\mathbf{R}}_j(t)) \right\rangle. \quad (2.15)$$

В классическом приближении корреляционная функция  $G(\mathbf{r}, t)$  приводится к простому виду [62]:

$$G(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{N} \left\langle \sum_{i,j=1}^N \delta(\mathbf{r} + \mathbf{R}_i(0) - \mathbf{R}_j(t)) \right\rangle, \quad (2.16)$$

где  $\mathbf{R}_i(0)$  - координата  $i$ -го атома в нулевой момент времени,  $\mathbf{R}_j(t)$  - координата  $j$ -го атома в момент времени  $t$ ,  $\langle \dots \rangle$  - статистическое усреднение.

ДСФ можно выразить и через корреляционную функцию скоростей

$$F(\mathbf{k}, t) = \frac{1}{N} \sum_{i,j=1}^N \left\langle \exp\{-i\mathbf{k}(\mathbf{R}_i(0) - \mathbf{R}_j(t))\} \right\rangle_{ion}, \quad (2.17)$$

которая связана с корреляцией плотности рассеивателей.

Действительно, обозначим плотность рассеивателей

$$\rho(\mathbf{r}, t) = \sum_{i=1}^N \delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i(t)). \quad (2.18)$$

Пространственная фурье-компонента (2.18) имеет вид:

$$\rho(\mathbf{k}, t) = \int \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}) \rho(\mathbf{r}, t) d\mathbf{r} = \sum_{i=1}^N \exp(i\mathbf{k}\mathbf{R}_i(t)), \quad (2.19)$$

Сравнивая (2.17) и (2.19), получим:

$$F(\mathbf{k}, t) = \frac{1}{N} \langle \rho(\mathbf{k}, t) \rho(-\mathbf{k}, 0) \rangle_{ion}. \quad (2.20)$$

Функция (2.20) связана с динамическим структурным фактором соотношением:

$$S(\mathbf{k}, \omega) = \frac{N}{2\pi} \int F(\mathbf{k}, t) \exp(-i\omega t) dt. \quad (2.21)$$

Покажем, что определения (2.14) и (2.21) эквивалентны, применив пространственное фурье преобразование к корреляционной функции скоростей:

$$\begin{aligned} G(\mathbf{r}, t) &= \int F(\mathbf{k}, t) \exp(-i\mathbf{k}\mathbf{r}) \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} = \\ &= \frac{1}{(2\pi)^3 N} \sum_{i,j=1}^N \int d\mathbf{k} \left\langle \int d\mathbf{r}' \exp(-i\mathbf{k}(\mathbf{R}_i(0) - \mathbf{r}' + \mathbf{r})) \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{R}_j(t)) \right\rangle_{ion} = \\ &= \frac{1}{N} \left\langle \sum_{i,j=1}^N \int d\mathbf{r}' \delta(\mathbf{r} + \mathbf{R}_i(0) - \mathbf{r}') \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{R}_j(t)) \right\rangle_{ion} \\ &= \frac{1}{N} \left\langle \sum_{i,j=1}^N \delta(\mathbf{r} + \mathbf{R}_i(0) - \mathbf{R}_j(t)) \right\rangle_{ion} \end{aligned} \quad (2.22)$$

### 2.3. ДСФ мультикомпонентной системы

Реальные мишени часто имеют многокомпонентный состав решетки, то есть содержат более одного типа атома в элементарной ячейке. В подобном случае для

вычисления ДСФ должны использоваться функции  $G(\mathbf{r}, t)$ , которые бы учитывали многокомпонентность рассеивающей системы. В двухкомпонентной системе дифференциальное сечение рассеяния электрона может быть определено [63] согласно выражению (2.14), в котором ДСФ «заряд-заряд» учитывает парциальные корреляционные функции,

$$\frac{\partial^2 \sigma}{\partial \Omega \partial E} = |U_{e-e}(\mathbf{k})|^2 \frac{m^2}{4\pi^2 \hbar^5} \frac{k_f}{k_i} S_{2-comp}(\mathbf{k}, \omega) \quad (2.23)$$

$$S_{2-comp}(\mathbf{k}, \omega) = \frac{N}{2\pi} \int dt d\mathbf{r} e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)} \{ q_1 q_1 G_{1-1}(\mathbf{r}, t) + q_1 q_2 G_{1-2}(\mathbf{r}, t) + q_2 q_1 G_{2-1}(\mathbf{r}, t) + q_2 q_2 G_{2-2}(\mathbf{r}, t) \} \quad (2.24)$$

Здесь  $U_{e-e}(\mathbf{k})$  - фурье-образ потенциальной энергии взаимодействия двух элементарных зарядов,  $q_1$  и  $q_2$  - модельные заряды ионов решётки, а функции  $G_{\alpha-\beta}(\mathbf{r}, t)$  описывают парные пространственно-временные корреляции атомов сортов  $\alpha$  и  $\beta$ :

$$G_{\alpha-\beta}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{N} \left\langle \sum_{i=1}^{N_\alpha} \sum_{j=1}^{N_\beta} \delta(\mathbf{r} + \mathbf{R}_i^\alpha(0) - \mathbf{R}_j^\beta(t)) \right\rangle, \quad (2.25)$$

где  $N = N_\alpha + N_\beta$ ,  $\alpha, \beta = 1, 2$ .

В общем случае мультикомпонентной системы функция  $G(\mathbf{r}, t)$  имеет вид:

$$G(\mathbf{r}, t) = \sum_{\alpha=1}^B \sum_{\beta=1}^B q_\alpha q_\beta G_{\alpha-\beta}(\mathbf{r}, t), \quad (2.26)$$

где  $B$  - число типов атомов в исследуемой системе  $q_\alpha$  и  $q_\beta$  - модельные заряды ионов решётки. Корреляционная функция многокомпонентной системы (2.26) однозначно определяет вид ДСФ «заряд-заряд».

## 2.4. Предельные случаи динамики системы рассеивателей в формализме ДСФ (мгновенное приближение)

Если время взаимодействия налетающего электрона с ионной подсистемой кристалла на длине динамической корреляции его атомов много меньше времени атомных осцилляций, то, очевидно, динамическая реакция системы атомов на вносимое возмущение будет отлична от фононной и механизм электрон-решётчного взаимодействия будет отличен от электрон-фононного механизма. При этом реализуется мгновенное приближение электрон-решётчного взаимодействия, когда атомы решётки заморожены в своих текущих положениях и динамически независимы. Пространственно-временная корреляционная функция в этом приближении, имеет вид [56]:

$$G_{inst}(\mathbf{r}, t) = G(\mathbf{r}, 0) - G_{id}(\mathbf{r}, 0) + G_{id}(\mathbf{r}, t), \quad (2.27)$$

где  $G_{id}(\mathbf{r}, t)$  - парная корреляционная функция идеального газа.

Выражение для  $G_{id}(\mathbf{r}, t)$  в классическом случае имеет вид [57]:

$$G_{id}^{cl}(\mathbf{r}, t) = \left( \frac{\beta M}{2\pi t^2} \right)^{3/2} \exp\left( -\frac{\beta M r^2}{2t^2} \right), \quad (2.28)$$

где  $\beta = 1/(k_B T_i)$ .

Подставляя (2.27) в определение ДСФ (2.14), получим выражение для ДСФ в мгновенном приближении:

$$S_{inst}(\mathbf{k}, \omega) = S(\mathbf{k})\delta(\omega) - S_{id}(\mathbf{k})\delta(\omega) + S_{id}(\mathbf{k}, \omega). \quad (2.29)$$

Здесь  $S(\mathbf{k})$  - геометрический структурный фактор, который является усреднением (суммированием) ДСФ по всем частотам системы  $S(\mathbf{k}) = \int S(\mathbf{k}, \omega) d\omega$ .  $\delta(\omega)$  - дельта-функция Дирака,  $S_{id}(\mathbf{k}, \omega)$  - ДСФ идеального газа. Поскольку в идеальном газе движение различных атомов не скоррелировано, то его ДСФ учитывает

только динамическую корреляцию положений атома со своими же положениями в предыдущие моменты времени.

ДСФ идеального термализованного газа в классическом приближении записывается в виде [64]:

$$S(k, \omega) = \sqrt{\frac{M}{2\pi k_B T_i k^2}} \exp\left(-\frac{M\omega^2}{2k_B T_i k^2}\right), \quad (2.30)$$

где  $M$ - масса атома.

Таким образом, в мгновенном приближении скорость обмена энергией между электронной подсистемой и ионной (2.13) совпадает с таковой для идеального газа, поскольку в интеграл (2.13) даёт вклад только последнее слагаемое  $S_{id}(\mathbf{k}, \omega)$  в выражении (2.29).

## 2.5. Предельные случаи динамики системы рассеивателей в формализме ДСФ (гармоническое приближение)

В гармоническом приближении динамики решётки её атомы колеблются вблизи положений равновесия, и операторы атомных положений могут быть записаны в виде:

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{R}}_i(t) &= \mathbf{R}_{n_i} + \mathbf{r}_{\mu_i} + \hat{\mathbf{u}}(n_i, \mu_i, t) \\ \hat{\mathbf{R}}_j(0) &= \mathbf{R}_{n_j} + \mathbf{r}_{\mu_j} + \hat{\mathbf{u}}(n_j, \mu_j, 0) \end{aligned} \quad (2.31)$$

где  $\mathbf{R}_{n_i}$  - радиус-вектор  $n_i$ -й элементарной ячейки,  $\mathbf{r}_{\mu_i}$  - радиус-вектор равновесного положения  $\mu_i$ -го атома в данной ячейке,  $\hat{\mathbf{u}}(n_i, \mu_i, t)$  - смещение из положения равновесия  $\mu_i$ -го атома в ячейке  $n_i$  в момент времени  $t$ . Индексы  $n_i$  и

$n_j$  изменяются от 1 до  $N_{cell}$  ( $N_{cell}$  - число элементарных ячеек), индексы  $\mu_i$  и  $\mu_j$  изменяются от 1 до  $p$  ( $p$  - число атомов в элементарной ячейке).

Оператор отклонения атомов  $\hat{\mathbf{u}}$  от положения равновесия в фононном приближении (идеальная периодическая решётка) имеет вид [65]:

$$\hat{\mathbf{u}}(n, \mu, t) = \sqrt{\frac{\hbar}{2M_\mu N_{cell}}} \sum_{\mathbf{q}, \lambda} \frac{1}{\sqrt{\omega_\lambda(\mathbf{q})}} \times \left\{ b_{\mathbf{q}, \lambda} \mathbf{e}_\mu^{(\lambda)}(\mathbf{q}) e^{i[\mathbf{q}\mathbf{R}_n - \omega_\lambda(\mathbf{q})t]} + b_{\mathbf{q}, \lambda}^+ \mathbf{e}_\mu^{(\lambda)*}(\mathbf{q}) e^{-i[\mathbf{q}\mathbf{R}_n - \omega_\lambda(\mathbf{q})t]} \right\} \quad (2.32)$$

где  $M_\mu$  - масса атома с индексом  $\mu$ , индекс  $\lambda$  указывает на номер ветви колебаний в фононном спектре и принимает значения от 1 до  $3p$ ,  $b_{\mathbf{q}, \lambda}^+$  и  $b_{\mathbf{q}, \lambda}$  - операторы рождения и уничтожения фононов, соответственно,  $\mathbf{e}_\mu^{(\lambda)}$  - вектор поляризации фонона,  $\omega_\lambda(\mathbf{q})$  - частота фонона,  $\mathbf{q}$  - волновой вектор фонона.

Таким образом, ДСФ в гармоническом приближении описывает реакцию атомной системы на введённое возмущение через рождение и уничтожения фононов и может быть записан в однофононном приближении в виде [65]:

$$S^{ph}(\mathbf{k}, \omega) = \frac{L\hbar k^2 e^{-2W_{DW}}}{2N_{cell}M} \sum_{\mu_i=1}^p \sum_{\mu_j=1}^p e^{-i\mathbf{k}(\mathbf{r}_{\mu_i} - \mathbf{r}_{\mu_j})} \times \left[ \sum_{\mathbf{q}} \frac{1}{\omega_{\mathbf{q}}} \left[ \delta(\omega + \omega_{\mathbf{q}}) n_{\mathbf{q}} \sum_{n_i=1}^{N_{cell}} \sum_{n_j=1}^{N_{cell}} e^{-i(\mathbf{k}+\mathbf{q})(\mathbf{R}_{n_i} - \mathbf{R}_{n_j})} + \delta(\omega - \omega_{\mathbf{q}}) (n_{\mathbf{q}} + 1) \sum_{n_i=1}^{N_{cell}} \sum_{n_j=1}^{N_{cell}} e^{-i(\mathbf{k}-\mathbf{q})(\mathbf{R}_{n_i} - \mathbf{R}_{n_j})} \right] \right], \quad (2.33)$$

где  $n_{\mathbf{q}}$  - средние числа заполнения фононами состояний с волновым вектором  $\mathbf{q}$ . В выражении (2.33) предполагается: (а) вырождение фононных мод, (б) независимость вектора поляризации фононов от индекса  $\mu$ , (в) только один тип атомов в решетке (например, решетка алюминия). В предположении независимости вектора поляризации фононов от индекса  $\mu$ , величина  $L$  определяется как

$$L = \frac{1}{k^2} \sum_{\lambda} |\mathbf{k}e^{(\lambda)}|^2, \quad (2.34)$$

что дает  $L=4$  для алюминия.

Условие асимметричности для гармонического структурного фактора выполняется автоматически.

В выражении (2.33) фактор Дебая-Уоллера  $W_{DW}$  имеет вид:

$$W_{DW} = \frac{L\hbar k^2}{2MN_{cell}} \sum_{\mathbf{q}} \frac{1}{\omega(\mathbf{q})} \left( n(\mathbf{q}) + \frac{1}{2} \right). \quad (2.35)$$

## 2.6. Молекулярно-динамическая модель расчёта ДСФ

Для того, чтобы учесть в динамическом структурном факторе все возможные коллективные моды динамики решетки, использовалась молекулярно-динамическая модель расчета парной пространственно-временной корреляционной функции  $G(\mathbf{r}, t)$ .

Молекулярная динамика в классическом пределе рассматривает материал как систему классических взаимодействующих частиц. Реализация МД модели позволяет следить за положением и скоростью каждой частицы в любой момент времени, решая уравнения Ньютона.

Для моделирования уравнений движения частиц в работе использовался численный алгоритм Верле [52]:

$$\begin{aligned}
\mathbf{r}(t + \Delta t) &= \mathbf{r}(t) + \mathbf{v}(t)\Delta t + \frac{1}{2}\mathbf{a}(t)\Delta t^2 \\
\mathbf{a}(t) &= -\frac{1}{M}\nabla U(\mathbf{r}(t)) \\
\mathbf{a}(t + \Delta t) &= -\frac{1}{M}\nabla U(\mathbf{r}(t + \Delta t)) \\
\mathbf{v}(t + \Delta t) &= \mathbf{v}(t) + \frac{1}{2}\Delta t(\mathbf{a}(t) + \mathbf{a}(t + \Delta t))
\end{aligned}
\tag{2.36}$$

Здесь  $\mathbf{r}(t)$  и  $\mathbf{r}(t + \Delta t)$ ,  $\mathbf{v}(t)$  и  $\mathbf{v}(t + \Delta t)$ ,  $\mathbf{a}(t)$  и  $\mathbf{a}(t + \Delta t)$  – вектор положения, скорости и ускорения частицы в моменты времени  $t$  и  $t + \Delta t$ ,  $M$  – масса частицы.

Схема Верле проста в реализации, при расчёте занимает немного памяти компьютера и работает достаточно быстро.

К недостаткам МД моделей следует отнести их точность. Координаты частиц определяются с точностью до  $\Delta t^2$  в схеме Верле. Для сравнения, в схеме предиктор-корректор Нордсика-Гира их можно определить с точностью до  $\Delta t^6$  [52]. Однако, для количества шагов моделирования, необходимого в данной работе ( $\sim 10^4$ , величина шага по времени  $1.0 \cdot 10^{-15}$  сек), точность схемы Верле является вполне достаточной.

Основной проблемой при использовании метода МД для описания реальных систем является выбор потенциала взаимодействия между атомами вещества. Получение потенциалов из первых принципов представляет собой очень трудоёмкую задачу, решение которой без приближений практически невозможно. Поэтому обычно для описания межатомного взаимодействия используют феноменологические потенциалы. В частности, потенциал взаимодействия частиц подбирается таким образом, чтобы термодинамические и структурные параметры материала, рассчитанные с помощью этого потенциала, максимально совпадали с реальными параметрами материала мишени. О деталях использованных потенциалов см. Главу 4.

В представленной модели при МД расчёте корреляционной функции использовались периодические граничные условия и производилось стандартное для МД расчёта усреднение корреляционных функций [52]:



$$G(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{N\eta_T} \sum_{\chi=1}^{\eta_T} \sum_{i,j=1}^N \delta[\mathbf{r} + \mathbf{R}_i(t_\chi) - \mathbf{R}_j(t_\chi + t)], \quad (2.37)$$

где  $\eta_T$  - число временных шагов, по которым производится усреднение ( $\eta_T \approx 10^3$ ). При расчетах в выражении (2.37) расстояние  $r$  изменялось от 0 до  $\sim 2 \cdot 10^2$  Å, а время  $t$  изменялось в диапазоне от минус 10 до 10 пс. На вычисленный с помощью классического МД моделирования ДСФ налагалось условие асимметрии (2.10).

## 2.7. Тестирование модели расчёта ДСФ

Для тестирования МД программы расчёта ДСФ был выбран жидкий алюминий (при температуре  $T=943\text{K}$ ), поскольку:

а) для него существует широкий набор экспериментальных данных по определению ДСФ [58 – 61, 66],

б) в жидкости нет упорядоченной структуры и можно сконцентрироваться на отладке основных деталей алгоритма,

в) жидкий алюминий удобен в качестве модельной системы для оценки скорости электрон-решётчного обмена энергией, поскольку плотность состояний электронов в алюминии практически совпадает с плотностью состояний свободного электронного газа.

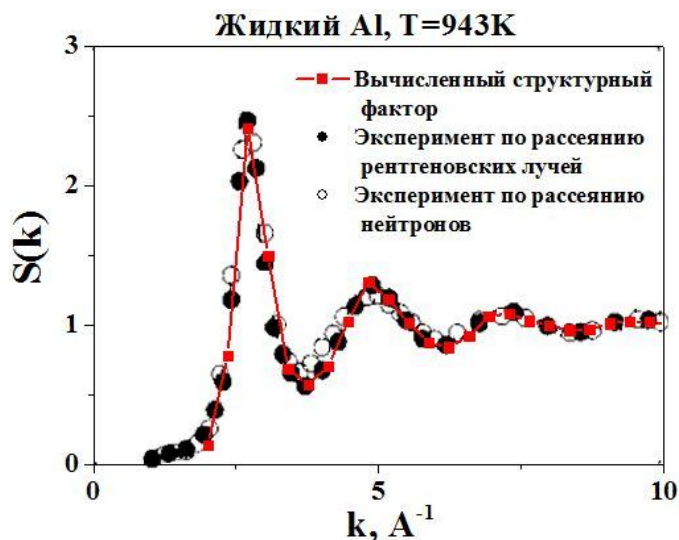
Для МД моделирования алюминия в работе использовался многочастичный межатомный потенциал, полученный методом совпадения сил (force-matching method) [67].

Для расчёта ДСФ жидкого алюминия моделировалась система, состоящая из 500 атомов в термодинамическом равновесии. Момент равновесия фиксировался по совпадению распределения энергий атомов с максвеловским распределением (прим. 2000 МД шагов) [52].

В силу изотропности жидкости её геометрический структурный фактор зависит лишь от модуля вектора  $\mathbf{k}$  и не зависит от его направления:

$$S(\mathbf{k}) = S(k) . \quad (2.38)$$

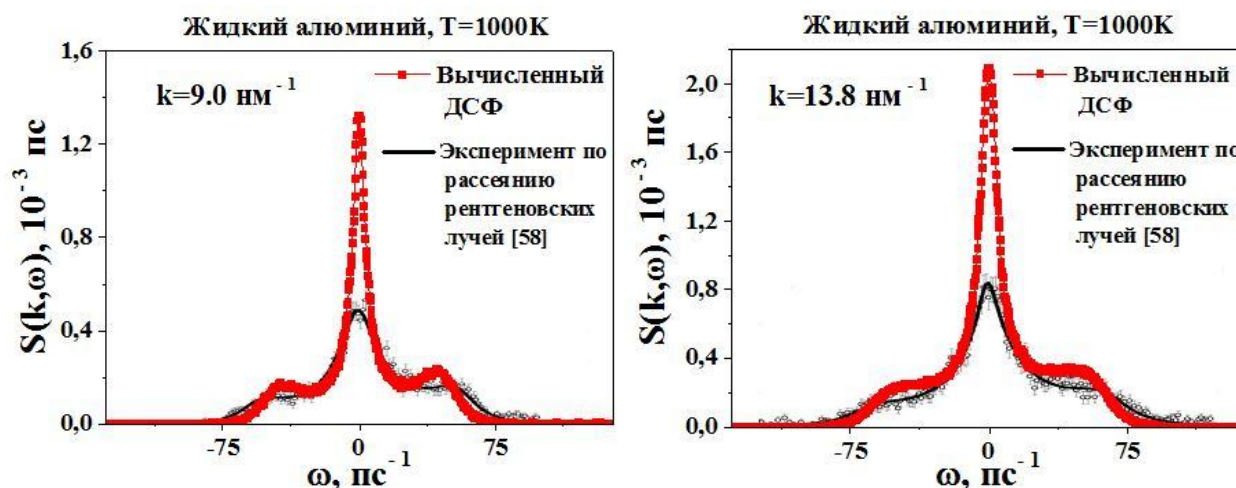
Рис. 1. демонстрирует совпадение рассчитанного геометрического структурного фактора жидкого алюминия с результатами эксперимента [59].



**Рисунок 1.** Геометрический структурный фактор жидкого алюминия. Красными квадратами показаны результаты расчёта в данной работе, белыми кругами - данные из эксперимента по рассеянию нейтронов [59], чёрными - по рассеянию рентгеновских лучей [59].

Зависимости ДСФ жидкого алюминия от частоты  $\omega$  при фиксированном значении величины волнового вектора  $k$  сравниваются с экспериментом [58] на рис. 2.

Анализ рис. 1 и 2 показывает, что численная процедура расчета ДСФ корректна. Небольшие отклонения результатов расчета от эксперимента на рис. 2 связаны с тем, что использованный МД потенциал не воспроизводит абсолютно точно динамических свойств Al, поскольку разрабатывался, в первую очередь, для моделирования температуры плавления, упругих и пространственных свойств решётки.



**Рисунок 2.** Динамический структурный фактор жидкого алюминия. Красными квадратами показаны результаты расчёта в данной работе, чёрной линией - данные эксперимента по рассеянию рентгеновских лучей [58].

## Заключение по Главе 2

В Главе 2 в рамках формализма динамического структурного фактора, учитывающего коллективную реакцию решётки на вносимое возбуждение, получено выражение для скорости электрон-решёточного обмена энергией, которая является ключевой величиной для описания кинетики возбуждения решётки материалов в треке БТИ.

Показана связь вероятности перехода системы «электрон + решетка» с ДСФ «заряд-заряд» решётки и связь этого ДСФ с парной пространственно-временной корреляционной функцией  $G(\mathbf{r}, t)$ .

Проанализированы различные предельные случаи динамической реакции атомов решётки, которые могут реализоваться при различных пространственно-временных характеристиках внешнего воздействия. Представлены аналитические выражения ДСФ для предельных случаев динамической реакции

конденсированной среды: (а) мгновенное приближение (модель динамически не связанных атомов) и (б) гармоническое приближение, соответствующее гармоническим колебаниям атомов вблизи положений равновесия (фононы).

Разработана молекулярно-динамическая модель расчета ДСФ, которая адекватно описывает экспериментальные данные.

## Выводы из Главы 2

На основании изложенного в настоящей главе можно сделать следующие выводы:

1. Скорость электрон-решётчного обмена энергией может быть описана в рамках формализма динамического структурного фактора, который автоматически учитывает эффект возникновения различных предельных случаев пространственно-временных корреляций в динамике решётки на вносимое возбуждение на фемто-пикосекундных масштабах релаксации нанометрических треков БТИ.
2. Определены условия возникновения различных предельных случаев реакции решетки на вносимое возбуждение (мгновенное приближение и гармоническое приближение).
3. Разработана молекулярно-динамическая модель расчета ДСФ, адекватно описывающая экспериментальные данные.

### Глава 3. Микроскопическая количественная модель возбуждения материалов в треках БТИ

#### 3.1. Базовые положения модели

Резкое различие в характерных временах кинетики электронной и ионной подсистем позволило разделить разработанную модель на блоки, работающие на разных временных интервалах возбуждения материала в треке БТИ.

На начальной стадии (до 10 фс после пролёта иона) использовалась ранее разработанная и оттестированная на экспериментах Монте-Карло (МК) программа [18-20], моделирующая кинетику возбуждения электронной подсистемы в треке. На начальных временах ( $\sim 0.01$  фс) эта программа описывала ионизацию материала быстрым тяжелым ионом, приводящую к появлению быстрых электронов. Далее ( $\sim 10$  фс) моделировалось пространственное распространение этих электронов и кинетика вызываемых ими ионизационных каскадов.

Важно, что МК модель учитывает в рамках формализма Комплексной Диэлектрической Функции (КДФ) коллективную реакцию электронной подсистемы мишени на возбуждение, вносимое БТИ и генерируемыми в треке быстрыми электронами.

Полученные в результате МК моделирования пространственные распределения делокализованных электронов и их энергий ко времени остановки ионизационных каскадов ( $\sim 10$  фс) использовались в качестве начальных условий для последующего моделирования распространения электронов и их взаимодействия с решёткой.

Основная задача заключалась в объединении этой МК модели возбуждения электронной подсистемы в треке БТИ с разработанной в рамках работ по тематике диссертации оригинальной моделью возбуждения решётки мишени, которая включает в себя описание распространения электронов после окончания ионизационных каскадов и кинетики передачи энергии от электронов в решетку.

Объединяющая процедура строилась следующим образом: из начальных условий МК вычислялись начальные пространственно-временные параметры ансамбля электронов (радиальные распределения концентрации и плотности энергии электронов), которые позволяли определить начальную скорость передачи энергии и импульса от электронов в решётку.

Дальше моделировалось пространственное распространение электронов, рассчитывались параметры их ансамбля и вычислялись скорости обмена энергией и импульсом на каждом новом шаге по времени в зависимости от расстояния от оси трека.

В итоге возникал пространственно-временной источник энергии в решетку, который использовался в дальнейшем для моделирования последующего возбуждения и релаксации материала в нанометрической окрестности траектории БТИ.

Построенная модель обмена энергией между делокализованными электронами и решеткой учитывает коллективную реакцию ионной подсистемы на вносимое возбуждение в рамках формализма ДСФ.

Следует отметить, что в отличие от других моделей, описывающих возбуждение материала в треке БТИ [10-12,33,34,46-48], представленная модель описывает взаимодействие делокализованных электронов с решеткой, не опираясь ни на фононное, ни на плазменное приближения динамики ионной подсистемы. Формализм КДФ-ДСФ автоматически учитывает оба эти предельных случая наряду со всеми другими возможными промежуточными динамическими состояниями облучаемого материала.

Разработанная оригинальная молекулярно-динамическая программа, описывающая динамику атомов мишени, использовалась как для вычисления

ДСФ решётки, так и для последующего перераспределения энергии и импульса в ионной подсистеме в треке БТИ на временах вплоть до нескольких пикосекунд после пролёта иона.

Важно, что применение микроскопического подхода позволило не использовать в модели подгоночных параметров.

### **3.2. Монте-Карло модель возбуждения электронной подсистемы материала**

Для определения начальных параметров возбужденного электронного ансамбля к моменту окончания ионизационных каскадов в треке БТИ использовалась ранее разработанная и оттестированная на экспериментах МК модель [18-20]. Она описывает начальную кинетику электронной подсистемы материала мишени в нанометрической окрестности траектории БТИ. На первой стадии МК код моделировал пролет БТИ и производимую им ионизацию мишени, то есть создание неравновесного ансамбля высокоэнергетичных делокализованных  $\delta$ -электронов. При описании рассеяния БТИ и быстрых электронов на электронной подсистеме материала использовалось первое борновское приближение. Это позволило записать сечения неупругого рассеяния налетающего иона и быстрых электронов на электронах мишени, используя формализм комплексной диэлектрической функции (КДФ) [20], когда коллективная реакция электронной подсистемы на вносимое возмущение определяется функцией отклика, совпадающей с мнимой частью обратной КДФ, зависящей от характера пространственно-временных (парных) корреляций в электронной подсистеме.

Отметим, что формализм КДФ эквивалентен формализму динамического структурного фактора (ДСФ) [56], который использовался в представленной

работе для описания возбуждения ионной подсистемы в треке БТИ. Действительно, флуктуационно-диссипативная теорема утверждает, что в случае локального равновесия:  $S^e(\mathbf{k}, \omega) = -(\hbar k^2 / 4\pi^2 e^2 n) \text{Im} \varepsilon_e^{-1}(\mathbf{k}, \omega)$ . Здесь  $S^e(\mathbf{k}, \omega)$  - ДСФ электронной подсистемы материала. Эта эквивалентность обеспечивает фундаментальное единство подходов, используемых при описании электронной и ионной подсистем мишени в представляемой обобщённой микроскопической модели возбуждения трека.

Итак, в первом борновском приближении сечение рассеяния налетающего иона и быстрых электронов на зарядовой плотности мишени имеет вид [68]:

$$\frac{\partial^2 \sigma_{elec}}{\partial(\hbar\omega)\partial k} = \frac{2Z_{eff}^2(v)e^2}{n_e \pi \hbar^2 v^2 k} \text{Im} \left( \frac{-1}{\varepsilon(\mathbf{k}, \omega)} \right), \quad (3.1)$$

где  $\mathbf{k} = \mathbf{k}_i - \mathbf{k}_f$  - изменение волнового вектора налетающей частицы;  $k = |\mathbf{k}|$ ;  $\mathbf{k}_i$  и  $\mathbf{k}_f$  - начальный и конечный волновые вектора налетающей частицы;  $\hbar\omega = E_i - E_f$  - изменение энергии этой частицы;  $E_i$  и  $E_f$  - начальная и конечная энергии рассеивающейся частицы;  $n_e$  и  $m_e$  - концентрация и масса электронов рассеивающей системы, соответственно.  $Z_{eff}$  - равновесный заряд частицы, взаимодействующей с зарядовой плотностью мишени (в случае налетающего электрона  $Z_{eff} = 1$ , для БТИ зависимость  $Z_{eff}(v)$  от скорости иона определялась с помощью формулы Баркаса [18];  $e$  - заряд электрона.

Функция отклика материала  $\text{Im}[-1/\varepsilon(\mathbf{k}, \omega)]$  формируется в модели в виде суммы осцилляторных функций Друде, параметры которых определяются из экспериментальных данных для оптических коэффициентов конкретного материала [69-71]:

$$\text{Im} \left[ \frac{-1}{\varepsilon(\mathbf{k}, \omega)} \right] = \sum_{i=1}^{n_{os}} \frac{A_i \gamma_i \hbar \omega}{[\hbar^2 \omega^2 - (E_{0i} + \hbar^2 k^2 / (2m_e))^2 + (\gamma_i \hbar \omega)^2]}, \quad (3.2)$$

где  $E_{0i}$  - характерная энергия осциллятора  $i$ ;  $A_i$  - доля электронов с энергией  $E_{0i}$ ;  $\gamma_i$  - коэффициент затухания энергии  $i$ -го осциллятора. Суммирование



производится по всем осцилляторам  $n_{os}$ . Процедура определения этих коэффициентов описана в работах [72-74].

Сечение (3.1) может быть использовано для вычисления длины свободного пробега электрона ( $\lambda=(n_e\sigma)^{-1}$ ) и энергетических потерь БТИ ( $-dE/dx$ ) [72-74].

В модели пренебрегалось упругими потерями, связанными с рассеянием БТИ на ионных остовах, поскольку такие потери составляют лишь доли процента по сравнению с неупругими потерями энергии иона.

Траектория иона в течение моделирования предполагалась прямолинейной, так как переданная энергия иона в каждом акте соударения существенно меньше его кинетической энергии. Пролет иона моделировался в тонком слое материала (10 нм) с периодическими граничными условиями на плоскостях, перпендикулярных траектории БТИ.

Применение сечения (3.1) для рассеяния БТИ в МК коде обеспечивает информацией о количестве и спектре первичных быстрых  $\delta$ -электронов. Распространение быстрых электронов, образованных в треке иона, моделируется шаг за шагом, учитывая вторичную и последующие ударные ионизации, распад дырок на глубоких и валентных оболочках и упругое рассеяние этих электронов на атомах решетки.

Для описания Оже-распадов дырок, возникающих на глубоких атомных оболочках, использовалось распределение Пуассона для времен распада. Средние времена распадов разных оболочек в этом распределении были взяты из работы [75].

МК моделирование проводилось до времени 10 фс после пролета иона. К этому времени (а) прекращались процессы вторичной ионизации, поскольку электроны релаксировали к своим низкоэнергетическим состояниям, и (б) возникало термализованное состояние электронного ансамбля с температурой отличной (значительно превышающей) от температуры решётки.

### **3.3. Пространственное распространение электронов после окончания ионизационных каскадов**

Процесс установления равновесия между температурами делокализованных электронов и решётки происходит главным образом за счет пространственного распространения возбужденных электронов и их упругого взаимодействия с атомами решетки после окончания ионизационных каскадов (~10 фс после пролета БТИ).

Полученные в рамках Монте-Карло расчета распределения плотности делокализованных электронов и плотности их энергии (а) позволяют восстановить для этого ансамбля электронов вид равновесной функции распределения Ферми, который в дальнейшем и используется [39], (б) формируют начальные условия для последующего моделирования пространственного перераспределения электронов и их обмена энергией с решеткой.

МК моделирование демонстрирует не только высокие концентрации и температуры ансамбля делокализованных электронов в треке БТИ, но и высокие значения градиентов этих величин в этой области. В дополнение к нанометрическим пространственным и пикосекундным временным масштабам кинетики релаксации электронного ансамбля это создает принципиальные проблемы для «стандартных» макроскопических подходов при описании пространственного перераспределения электронов и их энергии в области возмущения (простейшая проблема – учет движения фронта возмущения электронной подсистемы).

Общим методом описания пространственно-временной эволюции функции распределения электронов является решение многочастичного кинетического уравнения в фазовом пространстве. Однако такая задача даже для одночастичного приближения, реализующего шестимерное фазовое пространство переменных

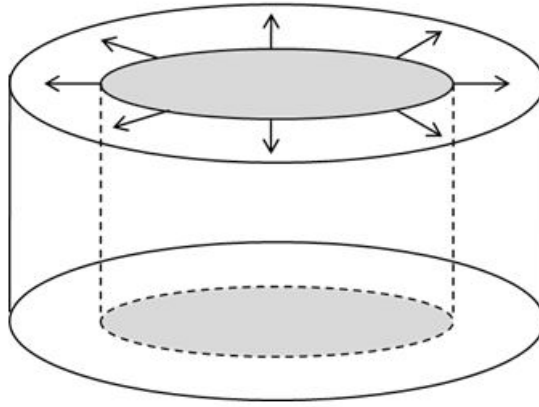
кинетического уравнения, является трудоемкой как в вычислительном плане, так и в плане численной реализации её решения.

Для упрощенного решения этой проблемы использовался тот факт, что характерное время термализации электронной подсистемы ( $\sim 10^{-15}$  сек) при возникающих в треке БТИ плотностях электронов много меньше времени её остывания ( $\sim 10^{-13}$  сек) [39].

Быстрая термализация ансамбля делокализованных электронов в треке приводит к занулению электрон-электронного интеграла столкновений, что позволяет (а) избежать решения общего кинетического уравнения и (б) для описания пространственного распространения электронов в окрестности траектории БТИ использовать простой молекулярно-кинетический подход, который применяется, начиная с момента, когда пространственное распространение возбужденных электронов меняет свое поведение с баллистического на диффузионное [37], до момента, когда температура электронов уравнивается с температурой решетки.

В реализуемых в треке БТИ начальных параметрах электронного ансамбля среднее расстояние между электронами примерно равно длинам их волн ( $\sim 0.5$  нм), а значит, эти электроны будут подчиняться квантовой статистике. С другой стороны, энергия взаимодействия между ними с учётом экранировки потенциала не превышает 1 эВ, что значительно меньше их средней кинетической энергии  $\sim 5$  эВ, что позволяет для этих электронов использовать приближение идеального газа (функция распределения Ферми-Дирака).

Поэтому при реализации молекулярно-кинетического подхода область трека разделялась на цилиндрические слои толщиной больше длины свободного пробега электронов, в которых предполагалось термализованное состояние ансамбля делокализованных электронов, и распределение электронов по скоростям задавалось равновесной функцией распределения, определяемой текущей плотностью энергии и концентрацией электронов в каждом слое (рис. 3). Толщина цилиндрических радиальных слоёв выбиралась в зависимости от расстояния до центра трека и в среднем была равна 0,5 нм.



**Рисунок 3.** Геометрия молекулярно-кинетического метода.

На последующих шагах моделирования учитывались изменения концентрации и плотности энергии электронов в каждом слое в результате обмена частицами и энергией между цилиндрическими слоями, а также передачи части избыточной энергии электронного ансамбля в решетку.

Различия в концентрации и плотности энергии возбужденных электронов в различных слоях, то есть пространственные градиенты этих величин, регулировали процесс движения электронов и их энергии между слоями.

Транспорт электронов и их избыточной энергии между слоями рассчитывался в предположении равномерного распределения электронов по степеням свободы и с учетом цилиндрической симметрии задачи.

В молекулярно-кинетическом методе поток электронов и общее число электронов, переходящих из слоя  $l$  в слой  $l+1$ , через цилиндрическую поверхность  $S_{l \rightarrow l+1}$  за время  $\Delta t$  вычислялся в виде:

$$\Delta N_{l \rightarrow l+1} = \Delta t \cdot \Phi_{l \rightarrow l+1} = \Delta t \cdot \int_{V_{\mathbf{k}_e}} \int_{S_{l \rightarrow l+1}} n_e^l \varphi(\mathbf{k}_e) \frac{\hbar \mathbf{k}_e}{m_e} d\mathbf{S} d\mathbf{k}_e, \quad (3.3)$$

где

$$\varphi(\mathbf{k}_e) = \frac{1}{n_e^l} \frac{2}{(2\pi)^3} \left[ \exp\left( \frac{\hbar^2 \mathbf{k}_e^2 / 2m_e - \mu(T_e^l, n_e^l)}{k_B T_e^l} \right) + 1 \right]^{-1}. \quad (3.4)$$

Здесь  $(\hbar \mathbf{k}_e) / m_e$  - скорость электрона,  $\varphi(\mathbf{k}_e)$  - нормированная функция распределения по импульсам электронов. Временной шаг  $\Delta t$  (0.2 фс) выбирался

таким образом, чтобы величина  $\langle (\hbar \mathbf{k}_e) / m_e \rangle \Delta t$  была много меньше, чем толщина слоя.

Для восстановления электронной температуры  $T_e^{(l)}$  и химического потенциала  $\mu^{(l)}(T_e^{(l)})$ , задающих текущий вид равновесной функции электронов в каждом цилиндрическом слое, использовались выражения для концентрации и плотности энергии электронного газа [37,76]:

$$\begin{aligned} n_e^l &= \frac{2m_e^{3/2}}{\sqrt{2\pi^2\hbar^3}} \int_0^\infty \left[ \exp\left(\frac{\varepsilon_e - \mu_l}{k_B T_e^l}\right) + 1 \right]^{-1} \times \sqrt{\varepsilon_e} d\varepsilon_e \\ E_e^l &= \frac{2m_e^{3/2}}{\sqrt{2\pi^2\hbar^3}} \int_0^\infty \left[ \exp\left(\frac{\varepsilon_e - \mu_l}{k_B T_e^l}\right) + 1 \right]^{-1} \times \varepsilon_e^{3/2} d\varepsilon_e \end{aligned} \quad (3.5)$$

где  $k_B$  – постоянная Больцмана.

### 3.4. Передача энергии в решётку мишени в результате ее взаимодействия с релаксирующими горячими электронами в треке БТИ

Знание функции распределения делокализованных электронов в каждом слое в каждый момент времени позволяет описать кинетику возбуждения решётки в треке БТИ в результате её взаимодействия с релаксирующим ансамблем электронов.

Моделирование процессов передачи энергии от электронов в решётку, электронной диффузии и ионной теплопроводности в нанометрической окрестности траектории БТИ было реализовано в рамках следующей схемы:

1) В качестве входных данных использовались локально равновесные функции распределения электронов в цилиндрических слоях, полученные из результатов

МК моделирования – концентрации и плотности энергий электронов, при помощи формулы (3.5).

2) Затем в рамках формализма ДСФ (см. Гл.2) рассчитывалась скорость изменения энергии электронной подсистемы в цилиндрических слоях за счёт взаимодействия с решёткой.

Охлаждение электронов в треке БТИ происходит за времена, меньшие 100 фс (см. Гл.4). Взаимодействие с электронами на этом промежутке времени не изменяет существенным образом характер динамики атомной системы. К тому же фронт возбуждения распространяется по невозмущенной решетке. Поэтому, в представленной работе, на каждом шаге моделирования в уравнении (2.13) использовался один и тот же ДСФ.

3) Затем определялась полная убыль энергии электронной подсистемы в слое за один шаг по времени, соответствующая данной скорости.

4) Далее определялось изменение концентрации и энергии электронов в слое за счёт электронной диффузии (молекулярно-кинетический метод).

5) Затем в цилиндрических слоях восстанавливались равновесные функции распределения электронов, соответствующие уже уменьшенной на предыдущем шаге плотности энергии и концентрации электронов.

6) Эти новые функции распределения подставлялись в следующий шаг моделирования. Процедура повторялась, и в результате вычислялись радиальные профили кинетической энергии, переданной в решётку, в различные моменты времени.

7) Избыточная энергия, передаваемая от электронов ко всем ионам в каждом цилиндрическом слое на каждом шаге моделирования, распределялась в соответствии с массовыми долями ионов решетки разного типа. Затем скорости ионов в слое увеличивались таким образом, чтобы увеличение их общей кинетической энергии в точности соответствовало энергии, передаваемой от электронной подсистемы.

Так как время передачи энергии от электронной подсистемы в решётку (~100 фс) меньше времени установления равновесия в ионной системе

(~200 фс - 1 пс [52]), то в качестве критерия «нагрева» решётки была выбрана её кинетическая температура, которой можно характеризовать неравновесную систему атомов [43,52,77]:

$$T_{kin}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{B} \sum_{\alpha=1}^B T_{kin-\alpha}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{B} \sum_{\alpha=1}^B \frac{M_{\alpha}}{3k_B(N_{\alpha}-1)} \sum_{n=1}^{N_{\alpha}} (\mathbf{v}_n - \langle \mathbf{v}_{\alpha} \rangle)^2, \quad (3.6)$$

где  $B$  – число типов атомов,  $N_{\alpha}$  - число атомов каждого типа в объеме, в котором определяется кинетическая температура ( $N_{\alpha} = N_{\alpha}^l$  - для  $l$ -того цилиндрического слоя),  $M_{\alpha}$  и  $\langle \mathbf{v}_{\alpha} \rangle$  - массы и средние скорости этих атомов, соответственно. В равновесии кинетическая температура совпадает с термодинамической.

Таким образом, нагревание решётки производилось непосредственно в процессе МД моделирования, что позволило учесть пространственное распространение возмущения в ионной подсистеме в процессе нагрева и его влияние на изменение распределений кинетической температуры и избыточной энергии решетки.

Как будет видно из главы 4, время установления теплового равновесия между возбужденными электронами и решёткой ~100 фс. После этого времени разница между температурами электронов и атомов решётки исчезает, поэтому, начиная с этого момента уравнивания температур электронов и ионов, использовалось приближение Борна-Оппенгеймера, то есть предполагалось, что температура электронов подстраивалась под температуру решетки. Это позволило прекратить отслеживание делокализованных электронов, начиная с этого времени, и с помощью МД метода моделировать только динамику атомов решетки для того, чтобы проследить кинетику дальнейшей релаксацией избыточной энергии решетки (распространение от траектории БТИ) на временах ~ 10 пс после пролёта иона.

### Заключение по Главе 3

В Главе 3 описывается общая структура разработанной микроскопической модели возбуждения и релаксации решётки материалов в треках БТИ, тормозящихся в режиме электронных потерь энергии. Модель состоит из трех взаимосвязанных блоков, описывающих возбуждение материала на разных временных масштабах. В качестве начального условия модель использует параметры возбужденного электронного ансамбля, полученные в результате моделирования его кинетики в рамках ранее разработанной и оттестированной на экспериментах МК программы [18-20].

Начальные условия из МК (радиальные распределения концентрации и плотности энергии электронов) позволяют вычислить начальные пространственно-временные параметры ансамбля электронов, произвести дальнейшее моделирование распространения электронов и обмена их энергией с решёткой. В результате определяется пространственно-временной источник энергии в решетку, который в дальнейшем используется для описания кинетики возбуждения материала после пролета БТИ.

Важно, что предложенная модель последовательно описывает все стадии начального возбуждения и релаксации твердого тела под действием налетающего БТИ.

Модель позволяет избежать излишних предположений относительно состояния и особенностей динамики электронной и ионной подсистем мишени и не использует подгоночных параметров.



### Выводы из Главы 3

На основании представленного в настоящей главе можно сделать следующие выводы:

1. Сформулирована микроскопическая модель, количественно описывающая возбуждение материала в треке БТИ.
2. Модель разбита на блоки, описывающие различные временные стадии кинетики возбуждения материала. Обеспечена логическая связь этих блоков.
3. Разработана численная процедура, обеспечивающая самосогласованную связь различных блоков модели.
4. Использование формализмов комплексной диэлектрической функции и динамического структурного фактора позволяет избежать излишних предположений относительно динамического состояния электронной и ионной подсистем мишени в треке БТИ.

## **Глава 4. Применение разработанной модели возбуждения трека БТИ к материалам, допускающим экспериментальную проверку (Al, LiF, оливин ( $Mg_2SiO_4$ ))**

В данной главе представлены результаты применения разработанной модели возбуждения треков БТИ к материалам, допускающим экспериментальную проверку: Al, LiF, оливин ( $Mg_2SiO_4$ ).

### **4.1. Эффект реализации различных предельных случаев динамической реакции решетки на скорость электрон-решётчного обмена энергией (Al)**

Кристаллический алюминий был выбран для иллюстрации зависимости скорости электрон-решётчного обмена энергией от температуры электронного ансамбля. Этот материал наиболее подходит для этого, потому что, во-первых, дисперсионный закон для электронов в зоне проводимости и плотность их состояний в алюминии практически совпадает с таковыми для состояний свободного электронного газа [10]. Во-вторых, для алюминия существует серия расчётов скорости обмена энергией между электронами и решёткой [10-12], что позволяет соотнести результаты представленной работы, выполненной на основании формализма ДСФ (см. главу 2), с этими расчётами. Кроме того, для алюминия можно провести сравнение результатов произведенных расчетов с экспериментальными данными [13 - 15].

Для расчета скорости электрон-решётчного обмена энергией использовалось выражение (2.12) в интегральном виде:

$$Q_{e-i} = -\frac{4}{(2\pi)^5 \hbar^2} \int d\mathbf{k}_i d\mathbf{k}_f E_{\mathbf{k}_i} |\tilde{U}(\mathbf{k})|^2 \left[ f_{\mathbf{k}_f}^{eq} (1 - f_{\mathbf{k}_i}^{eq}) S(-\mathbf{k}, -\omega) - f_{\mathbf{k}_i}^{eq} (1 - f_{\mathbf{k}_f}^{eq}) S(\mathbf{k}, \omega) \right], \quad (4.1)$$

где  $E_{\mathbf{k}} = (\hbar^2 \mathbf{k}^2) / 2m_e$  - энергия электрона. Функция Ферми  $f_{\mathbf{k}}^{eq}(T_e)$  используется для описания электронного ансамбля при различных температурах.

Для описания взаимодействия налетающего электрона и атома решётки был выбран экранированный кулоновский потенциал, то есть, используя адиабатический принцип, взаимодействие налетающего электрона с электронной подсистемой материала при этом рассеянии учитывалось экранировкой электрон-ионного взаимодействия.

$$U(r) = \frac{e_0}{r} e^{-\frac{r}{L_S}}, \quad (4.2)$$

где  $e_0$  - заряд электрона,  $L_S$  - длина экранировки [78]:

$$L_S^{-2} = 4\pi e_0^2 \frac{\partial}{\partial \mu} \int \frac{d\mathbf{k}}{4\pi^3} f_{\mathbf{k}}^{eq}, \quad (4.3)$$

где  $\mu(T_e)$  - химический потенциал, характеризующий электронный ансамбль.

Для расчета парной пространственно-корреляционной функции и, соответственно, ДСФ алюминия применялось МД моделирование. Использовался многочастичный межатомный потенциал, полученный методом совпадения сил (force-matching method) [67]:

$$E_{tot} = \sum_i F(n_i) + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} V_{ij}(R_{ij}), \quad (4.4)$$

$$n_i = \sum_{i \neq j} \rho_j(R_{ij}), \quad (4.5)$$

где  $E_{tot}$  - полная энергия связи атомов,  $V_{ij}(R_{ij})$  - потенциальная энергия их парного взаимодействия,  $F(n_i)$  - так называемая энергия погружения,  $\rho_j(R_{ij})$  - функция электронной плотности. Суммирование по  $i$  означает суммирование по всем атомам системы, каждое суммирование по  $j$  - по всем соседям  $i$ -го атома. Каждая функция в (4.4) и (4.5) описывалась набором точек, связанных между собой кубическим сплайном:

$$\Phi(x) = y_i + b_i(x - x_i) + c_i(x - x_i)^2 + d_i(x - x_i)^3, \quad (4.6)$$

где  $x_i < x < x_{i+1}$ ,  $x_i$  - узел сплайна,  $y_i$  - значение функции в узле сплайна,  $b_i$ ,  $c_i$  и  $d_i$  - коэффициенты интерполяционной функции  $\Phi(x)$ . Параметры сплайнов для потенциальной энергии  $V_{ij}(R_{ij})$  приведены в таблице 1 [67]. Функции электронной плотности  $\rho_j(R_{ij})$  - в таблице 2 [67]. Энергии погружения  $F(n_i)$  - в таблице 3 [67].

**Таблица 1.** Параметры сплайнов для потенциальной энергии  $V_{ij}(R_{ij})$  ( $x_i$  в Å и  $y_i$  в эВ).

$x_i$	$y_i$	$b_i$	$c_i$	$d_i$
2.0210	2.0051	-7.2241	9.3666	-4.3827
2.2730	0.7093	-3.3383	6.0533	-4.8865
2.4953	0.2127	-1.3713	2.7940	-2.3363
2.7177	0.0202	-0.4753	1.2357	-1.2893
2.9400	-0.0386	-0.1171	0.3757	-0.2907
3.1623	-0.0492	0.0069	0.1818	-0.3393
3.3847	-0.0424	0.0374	-0.0445	-0.0367
3.6070	-0.0367	0.0122	-0.0690	-0.2290
3.8293	-0.0399	-0.0524	-0.2217	0.4667
4.0517	-0.0574	-0.0818	0.0895	0.2227
4.2740	-0.0687	-0.0090	0.2381	-0.3170
4.4963	-0.0624	0.0499	0.0266	0.0796
4.7187	-0.0492	0.0735	0.0797	-0.2031
4.9410	-0.0311	0.0788	-0.0557	0.0980
5.1633	-0.0153	0.0686	0.0097	-0.2634
5.3857	-0.0024	0.0339	-0.1660	0.2612
5.6080	-0.0002	-0.0012	0.0083	-0.0102
6.0630	0.0000	-	-	-

**Таблица 2.** Параметры сплайнов для функции электронной плотности  $\rho_j(R_{ij})$  ( $x_i$  в  $\text{Å}$  и  $y_i$  в условных единицах).

$x_i$	$y_i$	$b_i$	$c_i$	$d_i$
2.0210	0.0824	0.0707	-0.1471	0.0554
2.2730	0.0918	0.0071	-0.1053	0.0460
2.5055	0.0883	-0.0344	-0.0732	0.0932
2.7380	0.0775	-0.0533	-0.0081	-0.0044
2.9705	0.0647	-0.0578	-0.0112	0.0432
3.2030	0.0512	-0.0560	0.0189	0.0040
3.4355	0.0392	-0.0465	0.0217	-0.0392
3.6680	0.0291	-0.0428	-0.0056	-0.0198
3.9005	0.0186	-0.0486	-0.0194	0.1593
4.1330	0.0082	-0.0318	0.0917	-0.1089
4.3655	0.0044	-0.0069	0.0157	-0.0242
4.5980	0.0034	-0.0035	-0.0012	0.0150
4.8305	0.0027	-0.0016	0.0093	-0.0218
5.0630	0.0025	-0.0008	-0.0059	0.0042
6.0630	0.0000	-	-	-

**Таблица 3.** Параметры сплайнов для энергии погружения  $F(n_i)$  ( $x_i$  в условных единицах и  $y_i$  в эВ).

$x_i$	$y_i$	$b_i$	$c_i$	$d_i$
0.0000	0.0000	-18.4387	86.5178	-141.1819
0.1000	-1.1199	-5.3706	44.1632	-192.2166
0.2000	-1.4075	-2.3045	-13.5018	62.9570
0.3000	-1.7100	-3.1161	5.3853	-19.2831
0.4000	-1.9871	-2.6175	-0.3996	21.0288
0.5000	-2.2318	-2.0666	5.9090	-24.3978

0.6000	-2.4038	-1.6167	-1.4103	25.6930
0.7000	-2.5538	-1.1280	6.2976	-18.7304
0.8000	-2.6224	-0.4304	0.6785	1.6087
0.9000	-2.6570	-0.2464	1.1611	0.4704
1.0000	-2.6696	-0.0001	1.3022	-2.3503
1.1000	-2.6589	0.1898	0.5971	-1.7862
1.2000	-2.6358	0.2557	0.0612	-1.7862

В [67] показано, что по сравнению с другими потенциалами, потенциал EAM, с представленным набором точек, определённым методом согласования сил, наиболее хорошо описывает параметры алюминия, а именно параметр решётки, энергию связи атомов, упругие константы, теплопроводность, температуру плавления.

Для расчёта ДСФ кристаллического Al моделировался NVE ансамбль (постоянное число частиц, объем и энергия), состоящий из 500 атомов в термодинамическом равновесии при температуре  $T_i=300\text{K}$  ( $7 \times 7 \times 7$  элементарных ячеек). Каждая элементарная ячейка Al содержит 4 атома и в равновесии имеет размер  $4,060 \times 4,060 \times 4,060 \text{ \AA}^3$ .

Концентрация электронов задавалась равной концентрации электронов в зоне проводимости алюминия. С учётом значения концентрации атомов алюминия и того, что на каждый атом алюминия в зоне проводимости приходится 3 электрона, эта концентрация электронов бралась равной величине  $n_e = 1.8 \cdot 10^{23} \text{ см}^{-3}$ .

Следует отметить, что ДСФ является четырехмерной функцией, определенной для всех возможных величин волнового вектора  $\mathbf{k}$  и частоты  $\omega$ . Формально это означает, что рассеивающийся электрон может передать в решётку произвольное количество энергии  $\hbar\omega$  и импульса  $\hbar\mathbf{k}$ . В действительности существуют ограничения на переданные в решётку энергию и импульс в одном акте рассеяния электрона. Например, в фоновом приближении динамики решётки максимальная энергия  $\hbar\omega$  и импульс  $\hbar\mathbf{k}$ , которые могут быть переданы в решётку в одном акте

рассеяния, ограничены максимальной энергией  $\hbar\omega_{ph}^{\max}$  и максимальным волновым вектором фонона  $\mathbf{k}_{ph}^{\max}$ .

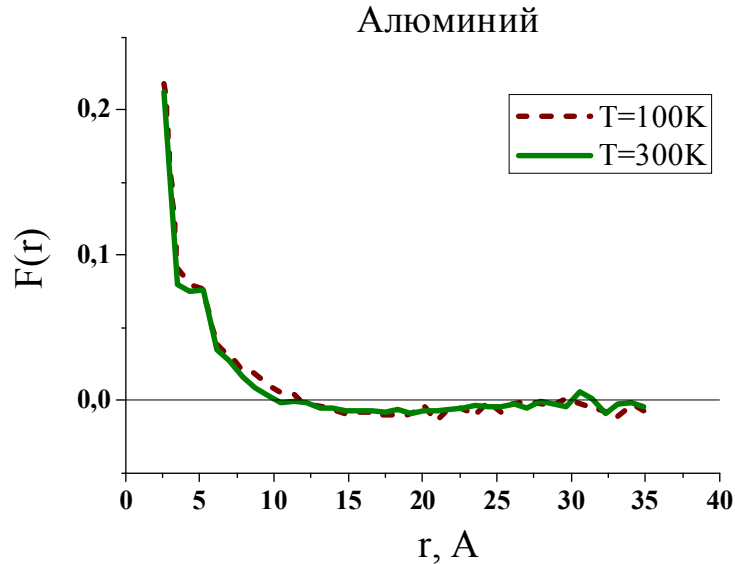
Для учета подобных ограничений при вычислении скорости электрон-решётчного обмена энергией предполагалось, что для электронов с энергиями меньше, чем пороговая энергия  $E_{thr}$  ( $E_k < E_{thr}$ ), времена взаимодействия с динамически коррелированным объемом решётки больше, чем время атомной осцилляции. Максимальный волновой вектор  $\mathbf{k}$  и энергия  $\hbar\omega$ , передаваемые в решётку, ограничены максимальным волновым вектором и энергией фонона в решетке.

Для рассеивающихся электронов с энергиями  $E_k > E_{thr}$  динамические корреляции между атомами решётки не существенны. В пределе высоких энергий электронов время их рассеяния настолько мало, что динамическая реакция атомов при упругом рассеянии не отличается от реакции идеального газа (мгновенное приближение). Принимая это во внимание, в работе считалось, что ограничения на переданные в решётку энергию и импульс при рассеянии электронов с энергиями  $E_k > E_{thr}$  задаются в виде аналогичном приближению парного столкновения электрона с атомом решётки.

Критерием, по которому отличались «быстрые» налетающие электроны от «медленных», т.е. по которому определялась величина пороговой энергии  $E_{thr}$ , является время пролёта электроном длины динамической корреляции атомов решётки. В качестве меры скоррелированности движения атомов наилучшим образом подходит среднее по времени скалярное произведение смещений атомов из своих положений равновесия [52]. Удобно также нормировать это произведение на средний по решётке квадрат смещения. Согласно этому введём нормированное среднее скалярное произведение смещений  $i$  и  $j$  атомов, которые находятся на расстоянии  $(r, r + dr)$ :

$$F(r) = \frac{\langle\langle (\mathbf{u}_i \mathbf{u}_j) \rangle\rangle}{\langle\mathbf{u}^2\rangle} \quad (4.7)$$

На рис. 4 представлены графики функции  $F(r)$  в Al, полученные в результате МД моделирования при различных температурах решётки. При расчёте усреднение производилось по всем парам атомов  $i$  и  $j$  и по времени.



**Рисунок 4.** График функции  $F(r)$  для алюминия при различных температурах решётки.

Из рис. 4 видно, что при  $r > 30 \text{ \AA}$  корреляциями в движении атомов в Al можно пренебречь.

Мгновенное приближение реализуется, когда время взаимодействия рассеивающегося электрона с динамически коррелированным объемом решётки значительно короче, чем характерное время корреляций в динамике атомов решётки (время атомных осцилляций в гармоническом приближении). Принимая это во внимание, в качестве максимальной величины (порога) времени взаимодействия, необходимого для реализации мгновенного приближения, было выбрано время  $t_{inst} \approx 1 \text{ fs} \ll 1/\omega_{osc}$ . Для этого времени  $t_{inst}$  и корреляционной длины  $l_{corr} \approx 30 \text{ \AA}$  порог по энергии электрона  $E_{thr} \approx 15 \text{ eV}$  отделяет фоновое и мгновенное приближения динамической реакции решётки на возбуждение, внесенное электроном. С учетом этого при интегрировании в уравнении (4.1) с



МД вычисленным ДСФ алюминия применялись «фононные ограничения», когда  $E_k < 15 \text{ eV}$ , и ограничения парных столкновений при  $E_k > 15 \text{ eV}$ .

Для сравнения вычислялась скорость электрон-решётчного обмена энергией с использованием гармонического ДСФ (2.33). В этом случае использовались «фононные ограничения» на переданные в решётку энергию и импульс для всех электронов независимо от их энергий. Это соответствует предположениям, сделанным в работах [10-12]. При расчёте ДСФ в гармоническом приближении использовалось экспериментально определённое для алюминия в [79] дисперсионное соотношение  $\omega(q)$ .

Скорость электрон-решётчного обмена энергией вычислялась также и для случая мгновенного приближения ДСФ (2.29).

Электрон-решётчный фактор скорости передачи энергии определялся по формуле [10]:

$$g_{e-i} = -\frac{\partial E}{\partial t} \cdot \frac{1}{T_e - T_i}, \quad (4.8)$$

где  $T_e$  – температура электронов,  $T_i$  – температура решётки,  $Q_{e-i} = -\frac{\partial E}{\partial t}$  – скорость передачи энергии от электронной подсистемы в решётку.

Результаты расчётов в мгновенном приближении, фононном приближении, а также с использованием точно рассчитанного  $g_{e-i}$  при помощи МД-ДСФ метода представлены на рис. 5. При расчёте через МД-ДСФ использовался описанный выше способ учёта эффекта скорости электронов относительно максимальных величин передаваемых в решетку энергии и импульса.

Из рис. 5 видно, что для температур электронного ансамбля  $T_e < 1 \cdot 10^4 \text{ K}$  характер зависимости  $g_{e-i}$  близок к рассчитанному в гармонической модели ДСФ, а для  $T_e > 3 \cdot 10^5 \text{ K}$  эта зависимость близка к мгновенному приближению. В переходной области температур наблюдается существенное отличие скорости электрон-решётчного обмена энергией от обоих предельных случаев.

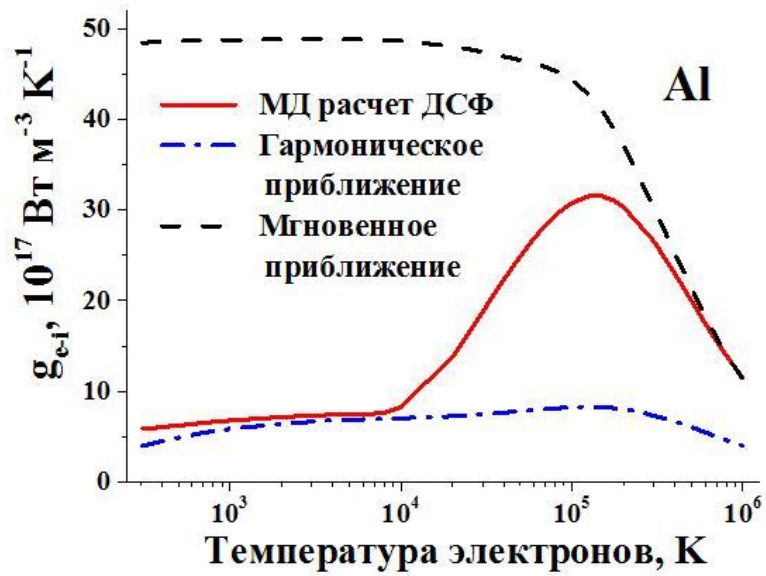
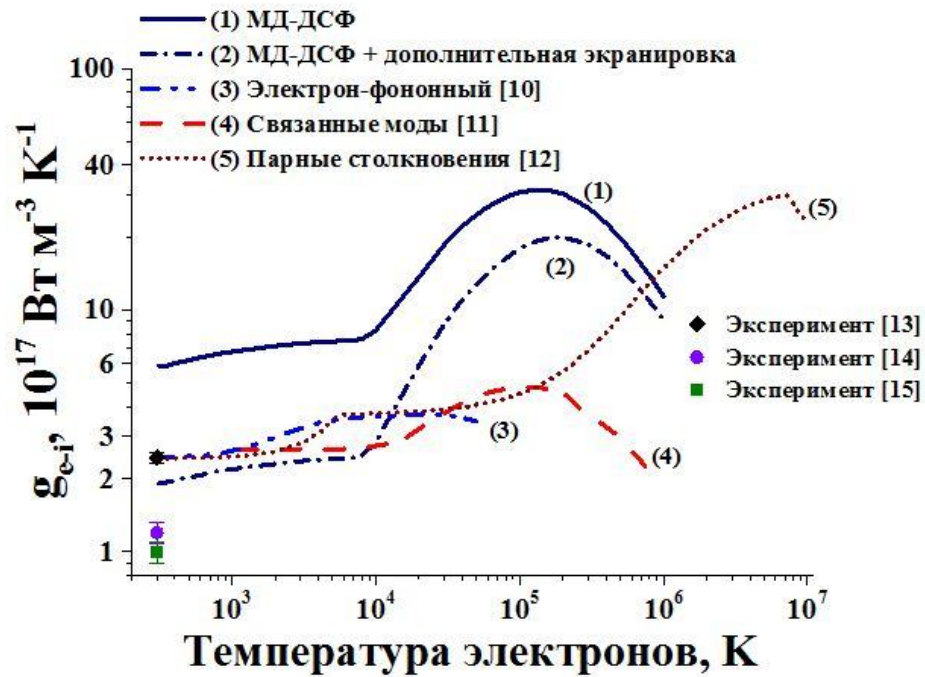


Рисунок 5. Электрон-решёточный фактор передачи энергии (Al).

#### 4.2. Зависимость скорости электрон-решёточного обмена энергией от температуры электронов (Al)

На рис. 6 сравниваются факторы  $g_{e-i}$ , рассчитанные в рамках представляемой модели, для Al с температурой решётки  $T_i=300\text{K}$  с полученными в работах [10-12] и измеренными в экспериментах [13-15].



**Рисунок 6.** Зависимость электрон-решёточных факторов передачи энергии от температуры электронов  $T_e \neq T_i$  ( $T_i=300\text{K}$ ) в Al.

Из рис. 6 видно, что кривая, полученная в МД-ДСФ модели, лежит выше экспериментальных точек [13-15] и расчетов других авторов [10-12] (в 2.5 – 3 раза) при низких температурах электронного ансамбля ( $T_e < 10^4 \text{ K}$ ). Подобное отличие связано со следующими обстоятельствами:

1) Экспериментальные точки [14,15] ( $g_{e-i}$  – фактор при  $T_e=T_i=300\text{K}$ ) отличаются более чем в 2 раза от экспериментальной точки из [13] и остальных расчетов. Это связано с различием применяемых экспериментальных методик в работах [13-15] и с различными параметрами лазерных источников, используемых в этих экспериментах для извлечения  $g_{e-i}$  – факторов. Кроме того, особо следует отметить, что в [13-15] для извлечения величины  $g_{e-i}$  – фактора использовалась двухтемпературная модель термической вспышки, применение которой проблематично для описания релаксации электронного возбуждения в подобных системах [40-43]. То есть экспериментальные точки требуют дополнительной верификации.

2) В работе [10] использовалась подгонка модели под экспериментальный результат [13]. Авторы [12] использовали 3 коэффициента для описания  $g_{e-i}$  –

фактора. Однако аргументы, приведенные в предыдущем пункте, показывают неоднозначность выбора экспериментальных данных [13-15] для подгоночной процедуры. Ввиду этого, в представленной работе процедура подгонки не использовалась.

3) МД-ДСФ метод учитывает все возможные коллективные моды решетки: оптические и акустические фононы, ангармонические вклады и др., увеличивая тем самым величину  $g_{e-i}$  – фактора по сравнению с расчетами других авторов.

4) В работе [45] было показано, что эффект связанных мод (взаимодействие коллективных электронных мод с коллективными атомными модами) приводит к дополнительной экранировке электрон-решёточного взаимодействия.

Этот эффект был оценен путем удвоения квадрата обратной длины экранировки (4.3). Кривая (2) учитывает этот возможный эффект экранировки и демонстрирует, что дополнительная экранировка понижает рассчитанную кривую  $g_{e-i}$  – фактора, приближая ее к расчетам других авторов и экспериментальным точкам. Это указывает на важность эффекта связанных мод, требующего дополнительных исследований.

Следует отметить, что в данном расчете предполагалась постоянная концентрация горячих электронов в алюминии. При температурах электронного ансамбля больших 60-70 эВ ( $\approx 10^6$ К) начинается активная ионизация  $L$ -оболочки атома Al [80]. Это увеличивает концентрацию делокализованных электронов в материале, поэтому в практических приложениях модели возможные изменения концентрации электронов при больших температурах электронного ансамбля ( $T_e > 10^6$ К) должны быть учтены.

### 4.3. Нагрев решётки LiF в результате ее взаимодействия с релаксирующими горячими электронами в треке БТИ

Фторид лития интересен тем, что в нём существует механизм конвертации избыточной энергии электронной подсистемы в наблюдаемые в эксперименте точечные дефекты (центры окраски) [81]. Действительно, кристаллы LiF имеют широкую запрещённую зону (14,6 эВ), поэтому энергии электрон-дырочных пар ( $> 14,6$  эВ), экситонов (13,6 эВ) и автолокализованных экситонов (4,8 эВ) превышают энергию (3,63 эВ) создания стабильных электронейтральных пар Френкеля в анионной подсистеме: F- и H- центров окраски. Поэтому механизм образования дефектов при релаксации электронного возбуждения реализуется в результате автолокализации дырок с последующим образованием и распадом автолокализованных анионных экситонов [81].

В силу электронейтральности эти точечные дефекты решётки захватывают носителей заряда, формируя дискретные наборы энергетических электронных уровней. Переход между этими уровнями приводит к излучению фотонов, непосредственно наблюдаемому спектроскопическими методами. Это свойство позволяет делать количественные заключения о параметрах возникающего при релаксации возбужденной электронной подсистемы ансамбля дефектов. В том числе в результате облучения БТИ.

Поэтому LiF является удобной модельной системой для экспериментального изучения эффектов, производимых тяжёлыми ионами в твёрдом теле, а значит и для проверки применимости разрабатываемых моделей. Например, отличия в термической стабильности различных центров окраски позволяет выстроить температурную шкалу, что дает информацию о достигнутом уровне возбуждения материала в решётке. Это свойство уже было использовано в работе [16] при оценке нагрева решётки LiF (низкого) в треках БТИ.

Для МД моделирования фторида лития использовался модифицированный межатомный потенциал Tosi-Fumi [82]:

$$V(r_{ij}) = \frac{Z_i Z_j e^2}{r_{ij}} + A_{ij} e^{-B_{ij} r_{ij}}. \quad (4.9)$$

Здесь заряды  $Z_{Li} = 1$ ,  $Z_F = -1$ , первое слагаемое отвечает кулоновскому взаимодействию между ионами решётки, второе – силам отталкивания, обусловленным перекрытием электронных оболочек. Параметры потенциала определялись согласно [82] и представлены в таблице 4.

**Таблица 4.** Параметры потенциала (4.9) согласно [82].

Тип связи	A, кДж/моль	B, Å <sup>-1</sup>
Li-Li	9545.7	3.3445
Li-F	38722	3.69
F-F	40569.2	3.3445

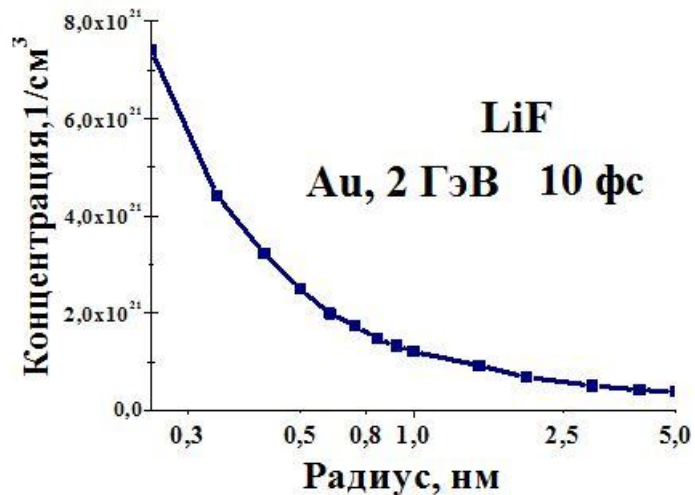
Возможные изменения межатомного потенциала взаимодействия, которые могут быть связаны с возбуждением электронной подсистемы кристалла (например, в результате эффектов нетермического плавления [83]), не были включены в предложенную модель. Эти процессы могут происходить только в очень близкой окрестности траектории иона (1 - 2 Å), если высокий уровень возбуждения электронной подсистемы будет сохраняться достаточно длительное время, чтобы стимулировать подобные нетепловые эффекты [51].

Для вычисления энергии кулоновского взаимодействия применялся стандартный для молекулярной динамики метод сумм Эвальда [84]. Для реализации МД модели использовался алгоритм Верле (2.36) с шагом по времени 1 фс.

Элементарная ячейка LiF содержит 8 атомов и в равновесии имеет размер 4,072x4,072x4,072 Å<sup>3</sup>. Для расчёта ДСФ моделировался NVE ансамбль, состоящий из 512 атомов LiF в термодинамическом равновесии при температуре T=300K

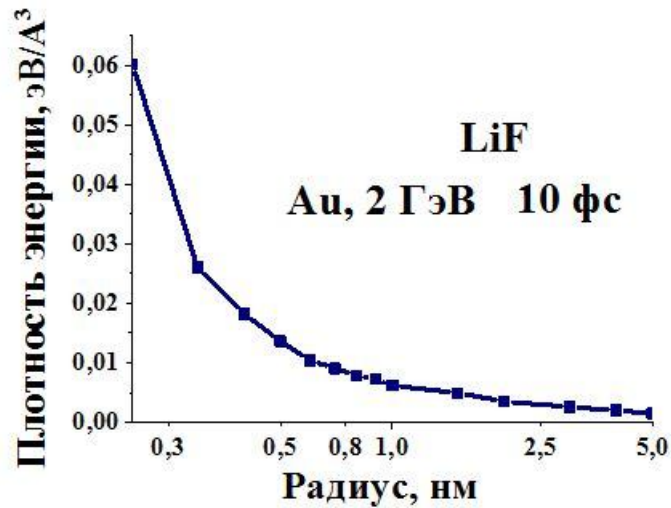
(4x4x4 элементарные ячейки). Для исследования возбуждения и нагрева решетки моделировалось 42x42x4 элементарных ячеек.

В качестве начальных условий использовались результаты МК расчета, в котором моделировался пролет иона Au с энергией 2 ГэВ. Полученные начальные распределения концентрации и плотности энергии делокализованных электронов в нанометрической окрестности траектории БТИ на момент окончания ионизационных каскадов (~10 фс), представлены на рис. 7 и 8.

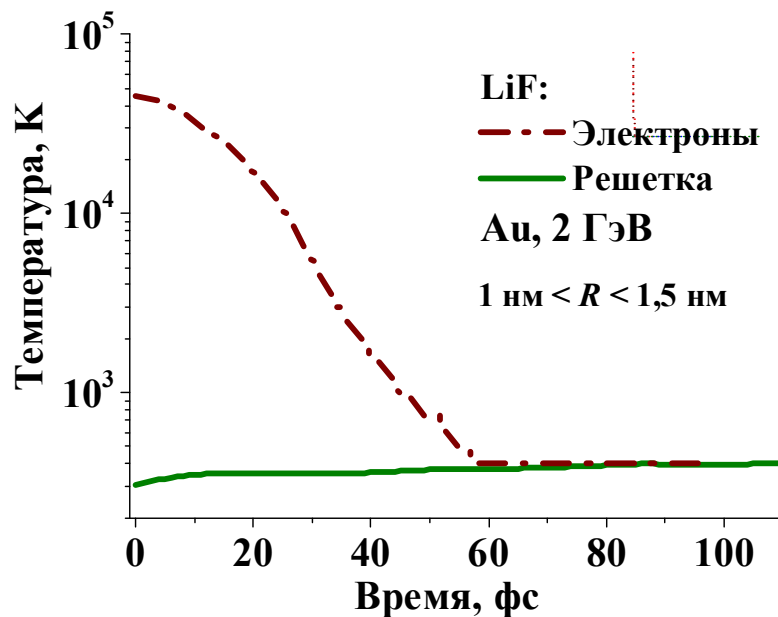


**Рисунок 7.** Радиальное распределение концентрации электронов в треке иона Au 2 ГэВ в LiF к моменту окончания ионизационных каскадов (10 фс после пролета иона).

Использование молекулярно-кинетического метода и схемы нагрева решетки, описанной в пункте 3.4, позволяет вычислить совместную кинетику релаксации температур возбужденных электронов и решётки. Рис. 9. демонстрирует, что выравнивание электронной и ионной температур, приводящее к прекращению взаимодействия электронов и решётки, в цилиндрическом слое  $1 \text{ нм} < R < 1.5 \text{ нм}$  происходит за время  $\sim 60$  фс. Для различных слоев профили температур электронов будут немного отличаться количественно, потому что концентрации электронов и величина температуры в разных слоях различны. Качественно же картины для всех слоёв одинаковые.



**Рисунок 8.** Радиальное распределение плотности энергии электронов в треке иона Au 2 ГэВ в LiF к моменту окончания ионизационных каскадов (10 фс после пролета иона).



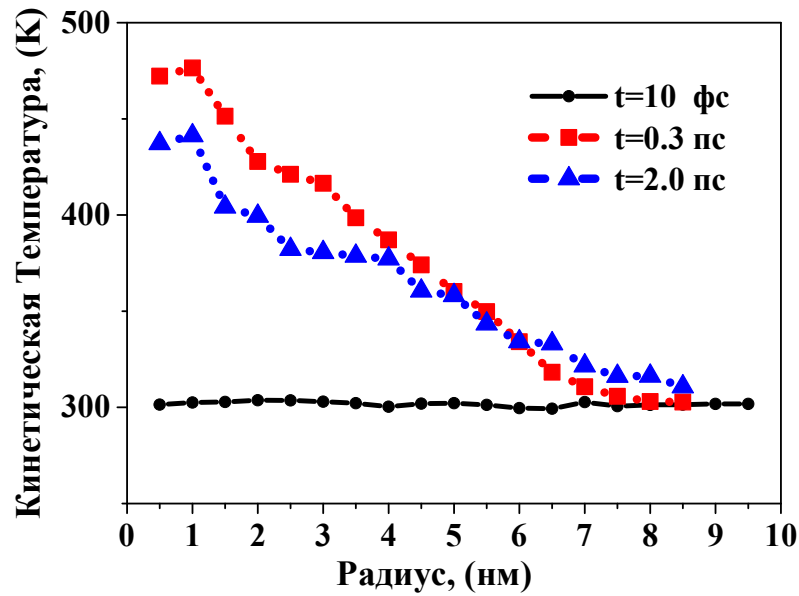
**Рисунок 9.** Временные зависимости температуры электронов и кинетической температуры атомов LiF в треке 2 ГэВ Au (в цилиндрическом слое на расстоянии  $1 \text{ нм} < R < 1,5 \text{ нм}$  от траектории БТИ).

Таким образом, обмен энергией между электронной и ионной подсистемами в треке БТИ прекращается на временах, сравнимых с наименьшими временами атомных осцилляций ( $\sim 50$  фс, оптические фононы). Это говорит о слабой



обоснованности применения электрон-фононного механизма для описания этого обмена в треках БТИ, что согласуется с выводами работы [39].

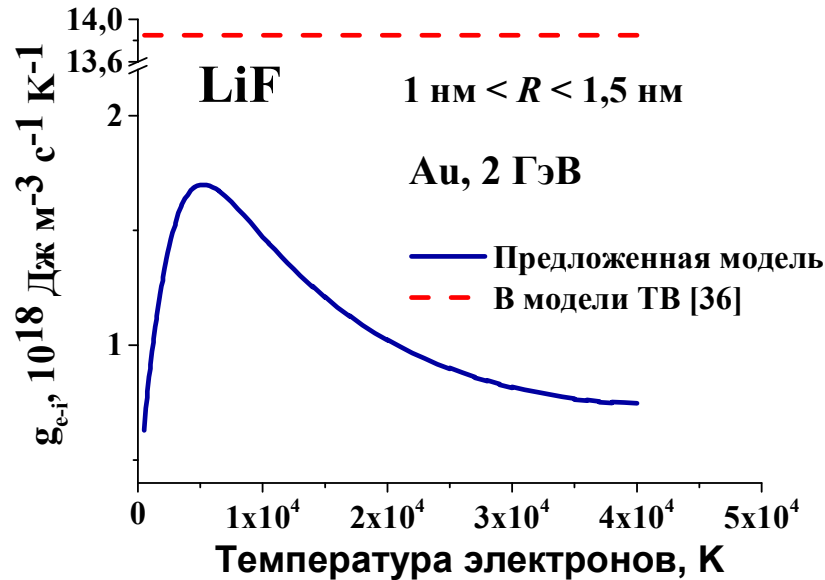
Зависимость радиального распределения кинетической температуры атомов решетки LiF от времени в нанометрической окрестности траектории БТИ представлена на рис. 10.



**Рисунок 10.** Радиальные зависимости кинетической температуры решётки LiF в треке 2 ГэВ Au в различные моменты времени после пролета иона.

Небольшое ( $\Delta T \sim 100\text{K}$ ) изменение кинетической температуры решётки LiF вследствие взаимодействия с электронной подсистемой наблюдается лишь на расстояниях меньших 4 нм от траектории БТИ. Это подтверждается результатами эксперимента [16] и не согласуется с выводами модели ТВ [36] о возможном достижении температур плавления-испарения в треках LiF. Нагрев более отдалённых от центра трека областей происходит за счёт пространственного распространения возбуждения в решётке. Так, температура решетки на 2 пс после пролета иона и расстояниях больших 6 нм превышает значение температуры в этой области ко времени 0.3 пс.

На рис. 11 сравнивается  $g_{e-i}$  – фактор (4.8), рассчитанный для LiF в рамках предлагаемой модели, с  $g_{e-i}$  – фактором, используемым в работе [36] (модель ТВ с использованием процедуры подгонки).



**Рисунок 11.** Зависимость  $g_{e-i}$  – фактора от температуры электронов в предлагаемой модели и в модели ТВ [36] (LiF).

Видно, что рассчитанный  $g_{e-i}$  – фактор резко зависит от температуры электронов, и его величина на порядок ниже значения  $g_{e-i} = 13,85 \cdot 10^{18} \text{ Дж м}^{-3} \text{ с}^{-1} \text{ К}^{-1}$ , приводимого в работе [36]. Существенно меньшее значение  $g_{e-i}$  – фактора приводит и к меньшему нагреву материала.

#### 4.4. Нагрев решётки оливина ( $Mg_2SiO_4$ ) в результате ее взаимодействия с релаксирующими горячими электронами в треке БТИ

Регистрация сверхтяжёлых элементов в составе космических лучей с использованием искусственных детекторов чрезвычайно затруднена ничтожностью величины потоков частиц вблизи Земли. Преодолеть эту трудность можно двумя путями: либо значительно (на несколько порядков) увеличивая площадь детекторов, что в условиях космоса сделать довольно трудно, либо увеличивая время экспозиции детектора в космическом пространстве. Эксперименты на аэростатах, искусственных спутниках земли и космических станциях длятся в течение нескольких лет, что, однако, оказывается недостаточным для осуществления эффективной регистрации сверхтяжёлых ядер. В то же время, в природе существуют естественные твердотельные детекторы, облучавшиеся длительное время (десятки и сотни миллионов лет) частицами космического происхождения - это кристаллы силикатных минералов, входящие в состав вещества метеоритов, которые способны регистрировать и сохранять в течение длительного времени ( $>10^8$  лет) треки ядер с  $Z>20$  [85-87].

Наиболее подходящими для проведения трековых исследований элементного состава галактических космических лучей являются метеориты типа палласитов, около 60% объема которых занимают кристаллы оливина.

Для МД моделирования форстерита ( $Mg_2SiO_4$ ) – кристалла из семейства оливинов ( $(Mg_x, Fe_{2-x})SiO_4$ ) использовался межатомный потенциал [88]:

$$V(r_{ij}) = \frac{q_i q_j e^2}{r_{ij}} + f(B_i + B_j) \exp\left(\frac{A_i + A_j - r_{ij}}{B_i + B_j}\right) - \frac{C_{o-o}}{r_{ij}^6}. \quad (4.10)$$

Здесь заряды  $Z_{Mg} = 1,3706$ ,  $Z_{Si} = 2,7412$ ,  $Z_O = -1,3706$ . Первое слагаемое отвечает кулоновскому взаимодействию, второе – силам отталкивания, обусловленным

перекрыванием электронных оболочек, последнее – силам Ван-дер-Ваальса. Параметры потенциала определялись согласно [88] и представлены в таблице 5.

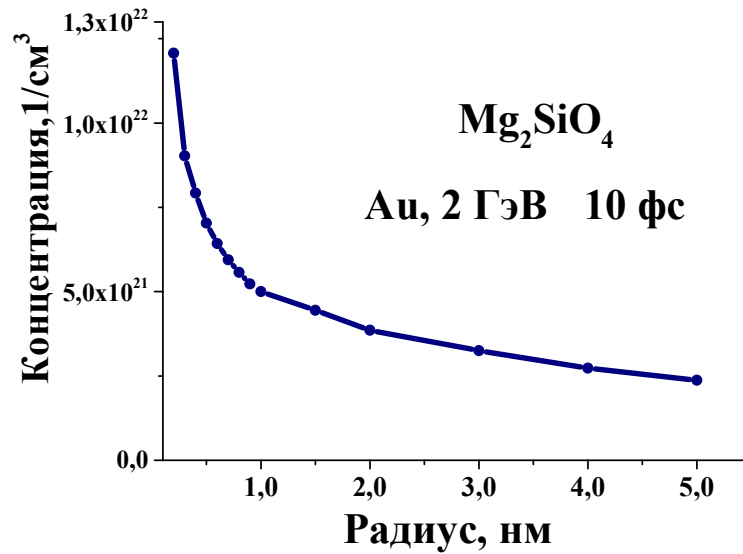
**Таблица 5.** Параметры потенциала (4.10) согласно [88].

Тип атома	A, Å	B, Å	C(O-O), Эрг / Å <sup>6</sup>
Mg	1.0134	0.06350	-
Si	0.96224	0.07563	-
O	1.6556	0.10627	$4.948 \cdot 10^{-11}$

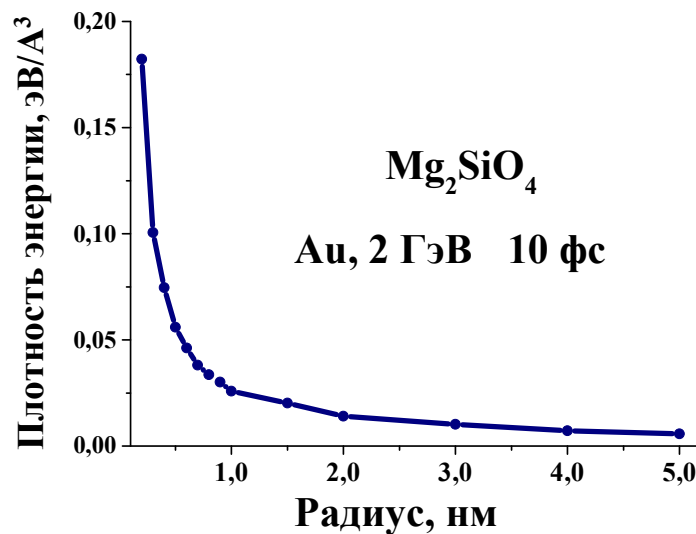
Для реализации МД модели использовался алгоритм Верле (2.36) с шагом по времени 1 фс. Для расчёта ДСФ форстерита моделировался NVT ансамбль, состоящий из 504 атомов в термодинамическом равновесии при температуре  $T=300\text{K}$  и содержащий  $3 \times 2 \times 3$  элементарные ячейки. Каждая элементарная ячейка содержит 28 атомов и в равновесии имеет размер  $4.75 \times 10.19 \times 5.98 \text{ Å}^3$ . Для исследования возбуждения и нагрева решетки моделировалось  $40 \times 20 \times 5$  элементарных ячеек. В процессе МД расчета использовались периодические граничные условия.

В качестве начальных условий использовались результаты МК расчета, в котором моделировался пролет иона Au с энергией 2 ГэВ в форстерите. Полученные начальные распределения концентрации и плотности энергии делокализованных электронов в нанометрической окрестности траектории БТИ на момент окончания ионизационных каскадов ( $\sim 10$  фс), представлены на рис. 12 и 13.

Использование молекулярно-кинетического метода и схемы нагрева решетки, описанной в пункте 3.4, позволяет описать кинетику совместной релаксации температур возбужденных электронов и решетки оливина.



**Рисунок 12.** Радиальное распределение концентрации электронов в треке иона Au 2 ГэВ в  $Mg_2SiO_4$  к моменту окончания ионизационных каскадов (10 фс после пролета иона).

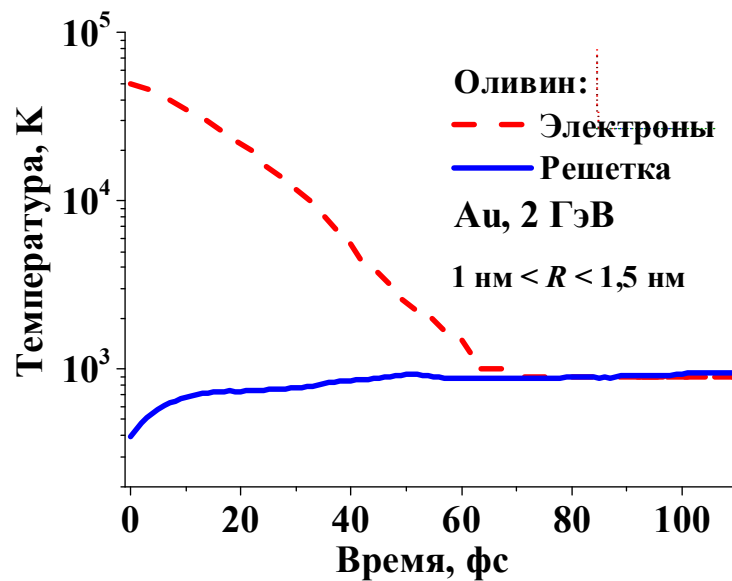


**Рисунок 13.** Радиальное распределение плотности энергии электронов в треке иона Au 2 ГэВ в  $Mg_2SiO_4$  к моменту окончания ионизационных каскадов (10 фс после пролета иона).

Рис. 14 демонстрирует, что выравнивание электронной и ионной температур, приводящее к прекращению взаимодействия электронов и решётки, в цилиндрическом слое  $1 \text{ нм} < R < 1,5 \text{ нм}$  происходит за время  $\sim 70 \text{ фс}$ . Для различных слоев профили температур электронов будут немного отличаться

количественно, потому что концентрация электронов и величина температуры в разных слоях различны. Качественно же картины для всех слоёв одинаковые.

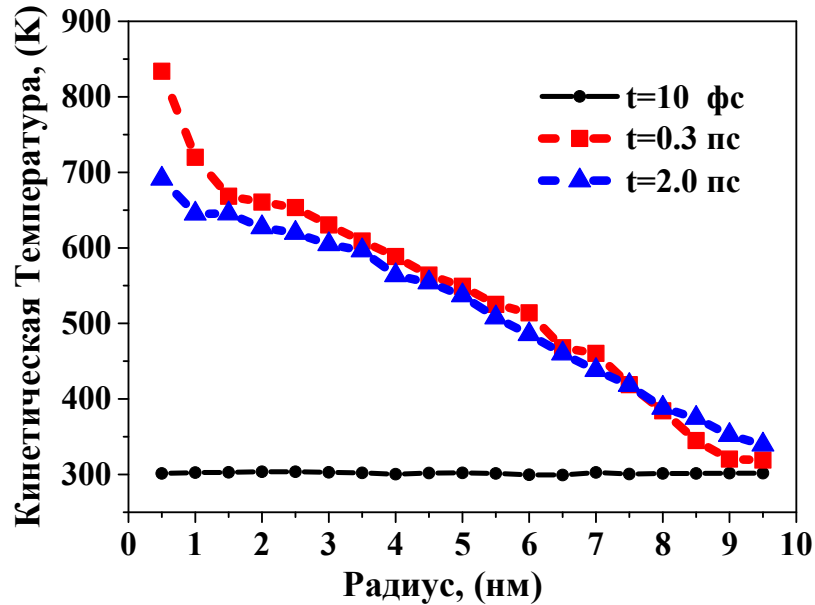
Подобно случаю с LiF обмен энергией между электронной и ионной подсистемами форстерита в треке БТИ прекращается на временах, сравнимых с наименьшими временами динамической корреляции атомов в решетке ( $\sim 50$  фс). Это говорит о сложностях применения электрон-фононного механизма для описания этого обмена в треках БТИ в оливине.



**Рисунок 14.** Временные зависимости температуры электронов и кинетической температуры атомов  $\text{Mg}_2\text{SiO}_4$  в треке 2 ГэВ Au (в цилиндрическом слое на расстоянии  $1 \text{ нм} < R < 1.5 \text{ нм}$  от траектории БТИ).

Зависимость радиального распределения кинетической температуры атомов  $\text{Mg}_2\text{SiO}_4$  в треке БТИ от времени представлена на рис. 15.

Рис. 15 показывает, что кинетическая температура решетки форстерита в треке БТИ повышается на  $\Delta T \sim 700 \text{ К}$  ( $r < 3 \text{ нм}$ ). Такой уровень температуры держится в центральной области ( $r < 3 \text{ нм}$ ) около 2 пс после пролета БТИ, медленно спадая впоследствии. Тем не менее эта температура почти вдвое ниже, чем температура плавления форстерита.



**Рисунок 15.** Радиальные зависимости кинетической температуры решётки  $\text{Mg}_2\text{SiO}_4$  в треке 2 ГэВ Au в различные моменты времени после пролета иона.

Уровень возбуждения решетки, достигаемый в треке БТИ в форстерите, превышает более чем в 3 раза этот уровень в LiF при тех же параметрах налетающего иона [41]. Это согласуется с тем, что в отличие от LiF в оливине детектируются структурные изменения [17] при превышении электронных потерь энергии БТИ порога в  $18 \text{ МэВ} \cdot \text{см}^2 \cdot \text{мг}^{-1}$  ( $5 \text{ кэВ/нм}$ ) [89].

Однако и в случае форстерита энергии, переданной в решётку при остывании делокализованных электронов, не хватает для стимулирования наблюдаемых структурных изменений. В частности, эти результаты указывают на необходимость учёта кинетики трансформации избыточной энергии дырочной подсистемы [18-20] при формулировании моделей структурных изменений в треке БТИ.

Результаты применения разработанной модели к LiF и оливину указывают на то, что модели структурных изменений, основанные только на эффекте повышения температуры в результате взаимодействия делокализованных электронов и решётки, могут ошибочно описывать кинетику возникновения трека БТИ. В результате проделанной работы наряду с аналитической аргументацией

этого вывода (быстрота остывания электронной подсистемы, отсутствие термализации решётки) получено его подтверждение на основе отестированного расчета, базирующегося на общих фундаментальных предположениях и не использующего подгоночных параметров.

#### Заключение по Главе 4

В Главе 4 разработанная микроскопическая модель (Гл. 3), описывающая возбуждение и релаксацию энергии в материалах в треках БТИ, тормозящихся в режиме электронных потерь энергии, была применена к материалам, допускающим экспериментальную проверку.

Для кристаллического алюминия исследованы различные предельные случаи влияния пространственно-временных корреляций в динамике ионной подсистемы на величину скорости передачи энергии в ионную подсистему. Показано, что зависимость электрон-решёточного фактора передачи энергии от температуры ансамбля делокализованных электронов в МД-ДСФ модели близка к кривой для гармонического ДСФ при малых температурах ( $T_e < 1 \cdot 10^4$  K), близка к кривой для мгновенного приближения ДСФ при больших температурах ( $T_e > 3 \cdot 10^5$  K), а в промежуточной области температур дает плавный переход между этими предельными случаями.

Величина фактора электрон-решёточного обмена энергией лежит выше экспериментальных точек [13-15] и расчетов других авторов [10-12] при низких температурах электронного ансамбля ( $T_e < 10^4$  K). Это связано с тем, что в отличие от расчетов других авторов [10-12] разработанная модель (а) учитывает все возможные коллективные моды решётки, (б) не использует процедуру



подгонки под экспериментальные данные, которые требуют дополнительной верификации.

Проведена оценка влияния дополнительной экранировки, обусловленной эффектом связанных мод, на  $g_{e-i}$  – фактор электрон-решётчного обмена энергией, которая указывает на важность этого эффекта, требующего дополнительных исследований.

В результате применения разработанной модели к кристаллу LiF получен небольшой нагрев решётки ( $\sim 100\text{K}$ ) в треке БТИ, который согласуется с экспериментальной оценкой [16] и не может быть объяснен моделью термической вспышки.

Рассчитанный уровень нагрева решётки оливина (выше, чем в LiF) коррелирует с наблюдаемыми структурными изменениями, которые видны в оливине [17] и не обнаруживаются в LiF [16]. Однако и в случае оливина нагрев решётки в треке БТИ не превышает температуры её плавления.

Небольшой нагрев решётки широко-щелевых диэлектриков в результате её взаимодействия с релаксирующим ансамблем делокализованных электронов указывает на то, что модели структурных изменений, основанные только на этом эффекте повышения температуры, могут ошибочно описывать кинетику возникновения трека БТИ. В результате проделанной работы получено подтверждение этого вывода на основе оттестированного расчета, базирующегося на общих фундаментальных предположениях и не использующего подгоночных параметров. Это говорит, в частности, о необходимости учета избыточной энергии дырочной подсистемы в моделях возбуждения трека.

**Выводы из Главы 4**

В результате применения в настоящей главе разработанной микроскопической модели возбуждения трека БТИ к материалам, допускающим экспериментальную проверку, (Al, LiF, оливин ( $Mg_2SiO_4$ )) можно сделать следующие выводы:

1. Электрон-ионный фактор скорости передачи энергии, рассчитанный без использования подгоночных параметров, для Al с температурой решётки  $T=300K$  показывает хорошее совпадение с расчетами других авторов.
2. Для температур электронного ансамбля  $T_e < 1 \cdot 10^4 K$  характер зависимости  $g_{e-i}$  близок к рассчитанному в гармонической модели ДСФ, а для  $T_e > 3 \cdot 10^5 K$  эта зависимость близка к мгновенному приближению. В переходной области температур наблюдается существенное отличие от обоих предельных случаев.
3. Дополнительная экранировка, обусловленная эффектом связанных мод, может существенно влиять на величину  $g_{e-i}$  – фактора, что указывает на необходимость дополнительных исследований этого эффекта.
4. Наблюдаемый небольшой нагрев кристалла LiF ( $\sim 100K$ ) согласуется с результатами эксперимента [16] и противоречит выводам классической модели двухтемпературной ТВ [36] о возможном достижении температур плавления-испарения в треках LiF.
5. Большой нагрев оливина ( $Mg_2SiO_4$ ) по сравнению с нагревом в LiF согласуется с экспериментом [17]. Однако и в этом случае достигаемых температур решётки не хватает для стимулирования наблюдаемых структурных изменений, которые обнаруживаются в эксперименте [17].
6. Полученные результаты, в частности, указывают на необходимость учёта дырочной подсистемы материала для создания модели структурных изменений в треках БТИ.

## Заключение

Основные результаты представленной работы могут быть сформулированы следующим образом.

Разработана новая микроскопическая модель, описывающая возбуждение решётки материалов в результате её взаимодействия с ансамблем возбужденных делокализованных электронов, генерируемых в треках БТИ, тормозящихся в режиме электронных потерь энергии.

Модель состоит из трех взаимосвязанных блоков, последовательно описывающих возбуждение материала на разных временных масштабах. Из начальных условий МК вычислялись начальные пространственно-временные параметры ансамбля электронов (радиальные распределения концентрации и плотности энергии электронов), которые позволили определить начальную скорость передачи энергии и импульса от электронов в решётку. Далее моделировалось пространственное распространение электронов и рассчитывались параметры их ансамбля. Полученный в итоге пространственно-временной источник энергии в решетку использовался для моделирования последующего возбуждения и релаксации материала в нанометрической окрестности траектории БТИ.

В разработанной модели не делается излишних предположений относительно особенностей состояния и динамики электронной и ионной подсистем мишени. Автоматический учет реализации различных предельных случаев пространственно-временных корреляций в динамике атомов в быстро релаксирующем наноразмерном треке БТИ производится с использованием формализма динамического структурного фактора (ДСФ), который учитывает коллективную реакцию ансамбля рассеивателей на вносимое возбуждение.

Алгоритм вычисления ДСФ оттестирован на примере экспериментальных данных для жидкого алюминия. Это подтверждает пригодность используемой МД модели расчёта ДСФ для описания реальных систем рассеивателей.

С использованием разработанной модели исследована зависимость скорости электрон-решётчного обмена энергией от температуры электронного ансамбля в кристаллическом алюминии. Для температур электронного ансамбля  $T_e < 1 \cdot 10^4$  K характер зависимости  $g_{e-i}$  близок к рассчитанному в гармонической модели ДСФ, а для  $T_e > 3 \cdot 10^5$  K эта зависимость близка к мгновенному приближению. В переходной области температур наблюдается существенное отличие от обоих предельных случаев.

В отличие от расчетов других авторов [10-12] разработанная модель (а) учитывает все возможные коллективные моды решётки, (б) не использует процедуру подгонки под имеющиеся экспериментальные данные, которые, по всей видимости, требуют дополнительной верификации.

Проведена оценка влияния дополнительной экранировки взаимодействия делокализованных электронов и решётки, которая обусловлена эффектом связанных мод, на  $g_{e-i}$  – фактор электрон-решётчного обмена энергией. Полученные результаты указывают на необходимость дополнительных исследований этого эффекта.

Применение разработанной модели к материалам, допускающим экспериментальную проверку (LiF, оливин), демонстрирует согласие с экспериментальными данными. Наблюдаемый небольшой нагрев в треке иона Au с энергией 2 ГэВ во фториде лития (~100K) согласуется с результатами эксперимента [16] и противоречит выводам модели ТВ [36] о возможном достижении температур плавления-испарения в треках LiF. Результаты расчёта показывают, что уровень возбуждения решётки в оливине в три раза больше, чем в LiF при тех же параметрах налетающего иона. Этот результат согласуется с тем, что при облучении оливина наблюдается аморфизация треков БТИ, а во фториде лития не наблюдается подобных структурных изменений. Однако и в случае

оливина рассчитанная температура решётки не превосходит температуры её плавления.

Небольшой нагрев решётки широко-щелевых диэлектриков в результате её взаимодействия с релаксирующим ансамблем делокализованных электронов указывает на то, что модели структурных изменений, основанные только на подобном нагреве, могут ошибочно описывать кинетику возникновения трека БТИ. В результате проделанной работы получено подтверждение этого вывода на основе оттестированного расчета, базирующегося на общих фундаментальных предположениях и не использующего подгоночных параметров.

Таким образом, полученные результаты чётко показывают принципиальные недостатки используемой сообществом модели двухтемпературной термической вспышки. Эти результаты, в частности, указывают на необходимость учёта дырочной подсистемы материала для создания модели структурных изменений в треках БТИ

Разработанная модель и результаты имеют фундаментальное значение для описания кинетики возникновения экстремального состояния вещества при релаксации его возбужденной электронной подсистемы и представляют интерес для развития моделей экстремальных состояний вещества в конденсированных средах.

Созданная модель может применяться как для тестирования альтернативных моделей возбуждения трека БТИ, так и служить основой для реалистических моделей наноразмерных структурно-фазовых превращений, вызываемых облучением БТИ, тормозящимися в режиме электронных потерь энергии.

**Обозначения**

ЛПЭ	– линейные потери энергии;
БТИ	– быстрый тяжелый ион;
МК	– Монте-Карло;
МД	– молекулярная динамика;
ДСФ	– динамический структурный фактор;
КДФ	– комплексная диэлектрическая функция;
ТВ	– термическая вспышка;

**Список использованной литературы**

1. Комаров, Ф.Ф. Дефектообразование и трекообразование в твёрдых телах при облучении ионами сверхвысоких энергий / Ф.Ф. Комаров // Успехи Физических Наук. – 2003. – Т. 173. – № 12. – С. 1287.
2. Митерев, А.М. Теоретические представления о формировании и эволюции треков заряженных частиц / А.М. Митерев // Успехи Физических Наук. – 2002. – Т. 172. – № 10. – С. 1131.
3. Chadderton, L.T. Nuclear tracks in solids: registration physics and the compound spike / L.T. Chadderton // Radiation Measurements. – 2003. – № 36. – P. 13.
4. Баранов, Я.А. Неупругое распыление твердых тел ионами / Я.А. Баранов, Ю.В. Мартыненко, С.О. Цепелевич и др. // Успехи физических наук. – 1988. – Т. 156. – Вып.3. – P. 477.
5. Aumayr, F. Single ion induced surface nanostructures: a comparison between slow highly charged and swift heavy ions / F. Aumayr, S. Facsko, A. S El-Said et al. // Journal of Physics: Condensed Matter. – 2011. – № 23. – P. 393001.
6. Кабанов, В.Я. Радиационная химия полимеров (обзор) / В.Я. Кабанов, В.И. Фельдман, Б.Г. Ершов и др. // Химия высоких энергий. – 2009. – Том 43. – № 1. – С. 5.
7. Castro, J.R. Treatment of cancer with heavy charged particles / J.R. Castro, W.T. Saunders, C.A. Tobias et al. // International Journal of Radiation Oncology\*Biophysics\*Physics. – 1982. – № 8. – С. 2191.
8. Vilaithong, T. Heavy ion induced DNA transfer in biological cells / T. Vilaithonga,

L.D. Yua, P. Apavatjrut et al. // Radiation Physics and Chemistry. – 2004. – Volume. 71. – Issue 3-4. – P. 927.

9. Itoh, N. Making tracks: electronic excitation roles in forming swift heavy ion tracks / N. Itoh, D.M. Duffy, S. Khakshouri et al. // Journal of Physics: Condensed Matter. – 2009. – № 21. – P. 474205.

10. Lin, Z. Electron-phonon coupling and electron heat capacity of metals under conditions of strong electron-phonon nonequilibrium / Z. Lin, L.V. Zhigilei, V. Celli // Physical Review B. – 2008. – № 77. – P. 075133.

11. Vorberger, J. Theory of electron-ion energy transfer applied to laser ablation / J. Vorberger, D.O. Gericke // International Symposium on High Power Laser Ablation, American Institute of Physics Conference Proceedings. – 2012. – № 1464. – P. 572.

12. Povarnitsyn, M.E. A wide-range model for simulation of pump-probe experiments with metals / M.E. Povarnitsyn, N.E. Andreev, E.M. Apfelbaum et al. // Applied Surface Science. – 2012. – № 258. – P. 9480.

13. Hostetler, J.L. Measurement of the electron-phonon coupling factor dependence on film thickness and grain size in Au, Cr, and Al / J.L. Hostetler, A.N. Smith, D.M. Czajkowsky et al. // Applied Optics. – 1999. – V. 38. – № 16. – P. 3614.

14. Li-Dan, Z. Study on ultra fast nonequilibrium heat transfers in nano metal films by femtosecond laser pump and probe method / Z. Li-Dan, S. Fang-Yuan, Z. Jie et al. // Acta Physica Sinica. – 2012. – V. 61. – № 13 – P. 134402.

15. Ma, W. Study of the Electron–Phonon Relaxation in Thin Metal Films Using Transient Thermoreflectance Technique / Z. Li-Dan, H. Wang, X. Zhang et al. // International Journal of Thermophysics (Special Conference Issue: Selected Papers of



the Ninth Asian Thermophysical Properties Conference). – 2013. – V. 34. – Issue 12. – P. 2400.

16. Schwartz, K. Effect of electronic energy loss and irradiation temperature on color-center creation in LiF and NaCl crystals irradiated with swift heavy ions / K. Schwartz, A.E. Volkov, M.V. Sorokin et al. // *Physical Review B*. – 2008. – № 78. – P. 024120.

17. Szenes, G. The effect of heavy cosmic-ray ions on silicate grains in the interstellar dust / G. Szenes, V.K. Kovacs, B. Pecz et al. // *The Astrophysical Journal*. – 2010. – № 708. – P. 288.

18. Medvedev, N.A. Early stage of the electron kinetics in swift heavy ion tracks in dielectrics / N.A. Medvedev, A.E. Volkov, N.S. Shcheblanov et al. // *Physical Review B*. – 2010. – № 82. – P. 125425.

19. Medvedev, N.A. Effect of spatial redistribution of valence holes on the formation of a defect halo of swift heavy-ion tracks in LiF / N.A. Medvedev, A.E. Volkov, K. Schwartz et al. // *Physical Review B*. – 2013. – № 87. – P. 104103.

20. Medvedev, N.A. Complex dielectric function formalism for description of the electron kinetics in swift heavy ion tracks in LiF and Y<sub>2</sub>O<sub>3</sub> // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B*. – 2013. – № 315. – P. 85.

21. Wilson, C.T.R. On a Method of Making Visible the Paths of Ionising Particles through a Gas / C.T.R. Wilson // *Proceedings of the Royal Society of London A*. – 1911. – № 85. – P. 285.

22. Price, P.B. Electron Microscope Observation of Etched Tracks from Spallation Recoils in Mica / P.B. Price, R.M. Walker // *Physical Review Letters*. – 1962. – № 8. – P. 217.

23. Platzman, R.L. Basic Mechanisms in Radiobiology. Part II: Physical and Chemical Aspects / Platzman, R.L. – USA: Washington, 1953.
24. Magee, J.L. Radiation chemistry of heavy-particle tracks. 1. General considerations / J.L. Magee, A. Chatterjee // The Journal of Physical Chemistry. – 1980. – № 84. – P. 3529.
25. Fleisher, R.L. Ion explosion spike mechanism for formation of charged-particle tracks in solids / R.L. Fleisher, P.B. Price, R.M. Walker // Journal of Applied Physics. – 1965. – Volume. 36. – Issue 11. – P. 3645.
26. Ritchie, R.H. A core plasma model of charged particle track formation in insulators / R.H. Ritchie, C. Claussen // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. – 1982. – Volume. 198. – Issue 1. – P. 133.
27. Гольданский, В.И. О гидродинамическом эффекте при прохождении осколков деления через конденсированное вещество / В.И. Гольданский, Е.Я. Ланцбург, П.А. Ямпольский // Письма в ЖЭТФ. – 1975. – Т. 21. – Вып.6. – С. 365.
28. Thompson, D.A. High density cascade effects / D.A. Thompson // Radiation Effects. – 1981 – Volume. 56. – Issue 3-4. – P. 105.
29. Lankin, A.V. Solid-density plasma nanochannel generated by a fast single ion in condensed matter / A.V. Lankin, I.V. Morozov, G.E. Norman et al. // Physical Review E. – 2009. – № 79. – P. 036407.
30. Itoh, N. Bond scission induced by electronic excitation in solids: A tool for nanomanipulation / N. Itoh // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B. – 1997. – Volume. 122. – Issue 3. – P. 405.

31. Itoh, N. Excitonic model of track registration of energetic heavy ions in insulators / N. Itoh, A. Marshall Stoneham // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B. – 1998. – № 146. – P. 362.
32. Yavlinskii, Yu.N. Electron excitation relaxation in wide-gap single crystal insulators under swift heavy-ion irradiation / Yu.N. Yavlinskii // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B. – 2000. – № 166/167. – P. 35.
33. Гинзбург, В.Л. Кинетическая температура электронов в металлах и аномальная электронная эмиссия / В. Л. Гинзбург, В. П. Шабанский // Доклады Академии наук СССР. – 1955. – Т. 100. – № 3. – С. 445.
34. Каганов, М.И. Релаксация между электронами и решёткой / М.И. Каганов, И.М. Лифшиц, Л.В. Танатаров // ЖЭТФ. – 1956. – Т. 31. – Вып. 2(8). – С. 232.
35. Каганов, М.И. Теория релаксационных изменений в металлах / М.И. Каганов, И.М. Лифшиц, Л.В. Танатаров // Атомная Энергия. – 1959. – Т 6. – С. 391.
36. Toulemonde, M. Transient thermal processes in heavy ion irradiation of crystalline inorganic insulators / M. Toulemonde, Ch. Dufour, A. Meftah et al. // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B. – 2000. – № 166-167. – P. 903.
37. Osmani, O. Energy dissipation in dielectrics after swift heavy-ion impact: A hybrid model / O. Osmani, N. Medvedev, M. Schleberger et al. // Physical Review B. – 2011. – № 84. – P. 214105.
38. Young, D.A. On the mechanism of the formation of latent tracks in dielectric solids / D.A. Young // Radiation Measurements. – 1997. – № 27. – P. 575.
39. Volkov, A.E. Heating of metals in swift heavy ion tracks by electron-ion energy

exchange / A.E. Volkov, V.A. Borodin // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B. – 1998. – № 146. – P. 137.

40. Gorbunov, S.A. The microscopic model of material excitation in swift heavy ion tracks / S.A. Gorbunov, N.A. Medvedev, P.N. Terekhin et al. // Physica Status Solidi C. – 2013. – № 10. – P. 697.

41. Gorbunov, S.A. Combined model of the material excitation and relaxation in swift heavy ion tracks / S.A. Gorbunov, P.N. Terekhin, N.A. Medvedev et al. // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B. – 2013. – № 315. – P. 173.

42. Gorbunov, S.A. Excitation and relaxation of olivine after swift heavy ion impact / S.A. Gorbunov, N.A. Medvedev, R. A. Rymzhanov et al. // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B. – 2014. – № 326. – P. 163.

43. Lipp, V.P. Kinetics of propagation of the lattice excitation in a swift heavy ion track / V.P. Lipp, A.E. Volkov, M.V. Sorokin et al. // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B. – 2011. – № 269. – P. 865.

44. Rethfeld, B. Ultrafast dynamics of nonequilibrium electrons in metals under femtosecond laser irradiation / B. Rethfeld, A. Kaiser, M. Vicanek et al. // Physical Review B. – 2002. – № 65. – P. 214303.

45. Dharma-wardana, M.W.C. Energy relaxation and the quasiequation of state of a dense two-temperature nonequilibrium plasma / M.W.C. Dharma-wardana, F. Perrot // Physical Review E. – 1998. – № 58. – P. 3705.

46. Szenes, G. General features of latent track formation in magnetic insulators irradiated with swift heavy ions / G. Szenes // Physical Review B. – 1995. – № 51. – P. 8026.

47. Мартыненко, Ю.В. Возбуждение электронов металла осколком деления / Ю.В. Мартыненко, Ю.Н. Явлинский // Атомная энергия. – 1987. – Т. 62. – вып. 2. – С. 80.
48. Toulemonde, M. Transient thermal process after a high-energy heavy-ion irradiation of amorphous metals and semiconductors / M. Toulemonde, C. Dufour, E. Paumier // Physical Review B. – 1992. – № 46. – P. 14362.
49. Toulemonde, M. Experimental phenomena and thermal spike model description of ion tracks in amorphisable inorganic insulators / M. Toulemonde, W. Assmann, C. Dufour et al. // Matematisk-fysiske Meddelelser Det Kongelige Danske Videnskabernes Selskab. – 2006. – № 52. – P. 263.
50. Insepov, Z. Surface erosion and modification by highly charged ions / Z. Insepov, M. Terasawa, K. Takayama // Physical Review A. – 2008. – № 77. – P. 062901.
51. Stegailov, V.V. Stability of LiF Crystal in the Warm Dense Matter State / V.V. Stegailov // Contributions to Plasma Physics. – 2010. – № 50. – P. 31.
52. Rieth, M. Nano-Engineering in Science and Technology / M. Rieth. – USA: World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd., 2003.
53. Режим доступа: <http://www.srim.org/>
54. Режим доступа: <http://geant4.web.cern.ch/>
55. Лифшиц, Е.М. Физическая кинетика / Е.М. Лифшиц, Л.П. Питаевский. – Москва: Физматлит, 2007.

56. Van Hove, L. Correlations in Space and Time and Born Approximation Scattering in Systems of Interacting Particles / L. Van Hove // *Physical Review*. – 1954. – № 95. – P. 249.
57. Angst, M. Scattering Methods for Condensed Matter Research: Towards Novel Applications at Future Sources / M. Angst, T. Brückel, D. Richter et al. – Jülich: Forschungszentrum Jülich GmbH, 2012.
58. Scopigno, T. Collective dynamics of liquid aluminum probed by inelastic x-ray scattering / T. Scopigno, U. Balucani, G. Ruocco et al. // *Physical Review E*. – 2000. – № 63. – P. 011210.
59. González, D.J. Orbital free ab initio molecular dynamics study of liquid Al near melting / D.J. González, L.E. González, J.M. López et al. // *Journal of Chemical Physics*. – 2001. – № 115. – P. 2373.
60. Gerald, R. Molecular-dynamics studies and neutron-scattering experiments on methylene chloride / R. Gerald, A. Geiger // *Molecular Physics*. – 1990. – № 70. – P. 465.
61. Hansen, J.P. *Theory of Simple Fluids* / J.P. Hansen, I.R. McDonald. – New York: Academic, 1986.
62. Aamodt, R. Quasi-Classical Treatment of Neutron Scattering / R. Aamodt, K.M. Case, M. Rosenbaum et al. // *Physical Review*. – 1962. – № 126. – P. 1165.
63. Bhatia, A.B. Aspects of the Electrical Resistivity of Binary Alloys / A.B. Bhatia, D.E. Thornton // *Physical Review B*. – 1970. – № 2. – P. 3004.

64. Montfrooij, W. Approach to ideal-gas behavior in dense classical fluids / W. Montfrooij, P. Verkerk, I. de Schepper // *Physical Review A*. – 1986. – № 33. – P. 540.
65. Jenö, S. *Fundamentals of the Physics of Solids. Structure and Dynamics* / S. Jenö. – Heidelberg: Springer-Verlag Berlin, 2007.
66. Stallard, J.M. Liquid-Aluminum Structure Factor by Neutron Diffraction / J.M. Stallard, C.M. Davis // *Physical Review A*. – 1973. – № 8. – P. 368.
67. Liu, X.Y. Aluminium interatomic potential from density functional theory calculations with improved stacking fault energy / X.Y. Liu, F. Ercolessi, J.B. Adams // *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*. – 2004. – № 12. – P. 665.
68. Akkerman A. Ion and electron track-structure and its effects in silicon: model and calculations / A. Akkerman, J. Barak, D. Emfietzoglou // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B*. – 2005. – № 227. – P. 319.
69. Palik, E.D. *Handbook of Optical Constants* / E.D. Palik. – San Diego: Academic Press, 1991.
70. Henke, B.L. X-Ray Interactions: Photoabsorption, Scattering, Transmission, and Reflection at  $E = 50\text{-}30,000$  eV,  $Z = 1\text{-}92$  / B.L. Henke, E.M. Gullikson, J.C. Davis // *Atomic Data and Nuclear Data Tables*. – 1993. – № 54. – P. 181.
71. Draine, B. T. Scattering by Interstellar Dust Grains. II. X-Rays / B. T. Draine // *The Astrophysical Journal*. – 2003. – № 598. – P. 1026.
72. Ritchie, R.H. Electron excitation and the optical potential in electron microscopy / R.H. Ritchie, A. Howie // *Philosophical Magazine*. – 1977. – № 36. – P. 463.

73. Akkerman, A. Inelastic Electron Interactions in the Energy Range 50 eV to 10 keV in Insulators: Alkali Halides and Metal Oxides / A. Akkerman, T. Boutboul, A. Breskin et al. // *Physica Status Solidi B*. – 1996. – № 198. – P. 769.
74. Medvedev, N.A. Modeling ultrafast electronic processes in solids excited by femtosecond VUV-XUV laser Pulse / N.A. Medvedev // *American Institute of Physics Conference Proceedings*. – 2012. – № 1464. – P. 582.
75. Keski-Rahkonen, O. Total and partial atomic-level widths / O. Keski-Rahkonen, M.O. Krause // *Atomic Data and Nuclear Data Tables*. – 1974. – № 14. – P. 139.
76. Ландау, Л.Д. Статистическая физика / Л.Д. Ландау, Е.М. Лившиц. – Москва: Физматлит, 2005.
77. Powles, J.G. Temperatures: old, new and middle aged / J.G. Powles, G. Rickayzen, D.M. Heyes // *Molecular Physics*. – 2005. – № 103. – P. 1361.
78. Ашкрофт, Н. Физика твердого тела / Н. Ашкрофт, Н. Мермин. – Москва: МИР, 1979. – 1 т.
79. Stedman, R. Dispersion Relations for Phonons in Aluminum at 80 and 300 K / R. Stedman, G. Nilsson // *Physical Review*. – 1966. – № 145. – P. 492.
80. Cardona, M. Photoemission in Solids I: General Principles / M. Cardona, L. Ley. – Berlin: Springer-Verlag, 1978.
81. Лущик, Ч.Б. Распад электронных возбуждений с образованием дефектов в твердых телах / Ч.Б. Лущик, А.Ч. Лущик. – Москва: Наука, 1989.
82. Belonoshko, A.B. Molecular dynamics of LiF melting / A.B. Belonoshko, R. Ahuja,



B. Johansson // *Physical Review B*. – 2000. – № 61. – P. 11928.

83. Rouse, A. Non-thermal melting in semiconductors measured at femtosecond resolution / A. Rouse, C. Rischel, S. Fourmaux et al. // *Nature*. – 2001. – № 410. – P. 65.

84. Toukmaji, Abdunour Y. Ewald summation techniques in perspective: a survey / Abdunour Y. Toukmaji, John A. Board Jr. // *Computer Physics Communications*. – 1996. – № 95. – P. 73.

85. Дюррани, С. Твердотельные ядерные детекторы / С. Дюррани, Р. Балл. – Москва: Энергоатомиздат, 1990.

86. Флейшер, Р.Л. Треки заряженных частиц в твёрдых телах / Р.Л. Флейшер, П.Б. Прайс, Р.М. Уокер. – Москва, Энергоатомиздат, 1981.

87. Fleischer, R.L. Origins of fossil charged-particle tracks in meteorites / R.L. Fleischer, P.B. Price, R.M. Walker et al. // *Journal of Geophysical Research*. – 1967. – № 72. – P. 331.

88. Leinenweber, K. A Transferable Interatomic Potential for Crystalline Phases in the System MgO-SiO<sub>2</sub> / K. Leinenweber, A. Navrotsky // *Physics and Chemistry of Minerals*. – 1988. – № 15. – P. 588.

89. Aleksandrov, A.B. Methods for Image Recognition of Charged Particle Tracks in Track Detector Data Automated Processing [Электронный ресурс] / A.B. Aleksandrov, N.G. Polukhina, N.I. Starkov // *Astrophysics*. – 2012. – Режим доступа: <http://www.intechopen.com/books/astrophysics/methods-for-image-recognition-of-charged-particle-tracks-in-track-detector-data-automated-processing>