

**Моделирования процессов взаимодействия тяжелых
ионов высоких энергий с металлами, на основе
развития континуально-атомистического подхода**

Тухлиев Зафар Камаридинович

Дубна 2025

Содержание

- Введение
- Модель термического пика с учётом фазовых переходов в металлах.
- Последовательное применение уравнений модели термического пика и метода молекулярной динамики.
- Континуально-атомистический подход.
- План будущих научных исследований.
- Публикации.

Общая характеристика работы

Доклад посвящен исследованию радиационных повреждений (треки, структурные дефекты, поры), возникающих в металлах, при облучении их тяжелыми ионами высоких энергий. Исследование проводилось на основе комбинации модели термического пика и метода молекулярной динамики.

- На первом этапе проводится моделирование термических процессов в металлах, облучаемых тяжелыми ионами высокой энергии в рамках модели термического пика с учетом фазовых переходов (плавление, кристаллизация).
- На втором этапе реализован подход, основанный на последовательном применении модели термического пика и метода молекулярной динамики. В этом подходе тепловые поля мишени, рассчитанные с помощью модели термического пика, используются для построения начальных условий в рамках молекулярно-динамического моделирования.
- На третьем этапе реализован континуально-атомистический подход на основе комбинации модели термического пика и метода молекулярной динамики для моделирования облучения металлической мишени тяжелыми ионами высоких энергий.

Актуальность исследований

Одной из перспективных и быстро развивающихся областей применения математического моделирования является радиационная физика. Одна из наиболее важных задач в разработке радиационных технологий – прогноз изменения структурно-фазового состояния облучаемой поверхности, которое зависит как от физических параметров вещества, так и от интенсивности источника излучения. Проведение натурных экспериментов в этих областях сопряжено с большими трудностями так как исследуемые процессы происходят за очень малые времена $t \approx 10^{-12} - 10^{-15}$ с, особенно важную роль приобретает проведение математического моделирования.

Цель работы

Целью работы является развития и программное реализация комбинированных методов для исследование термических процессов и радиационных повреждений в металлах облучаемых тяжелыми ионами высоких энергий.

Модель термического пика

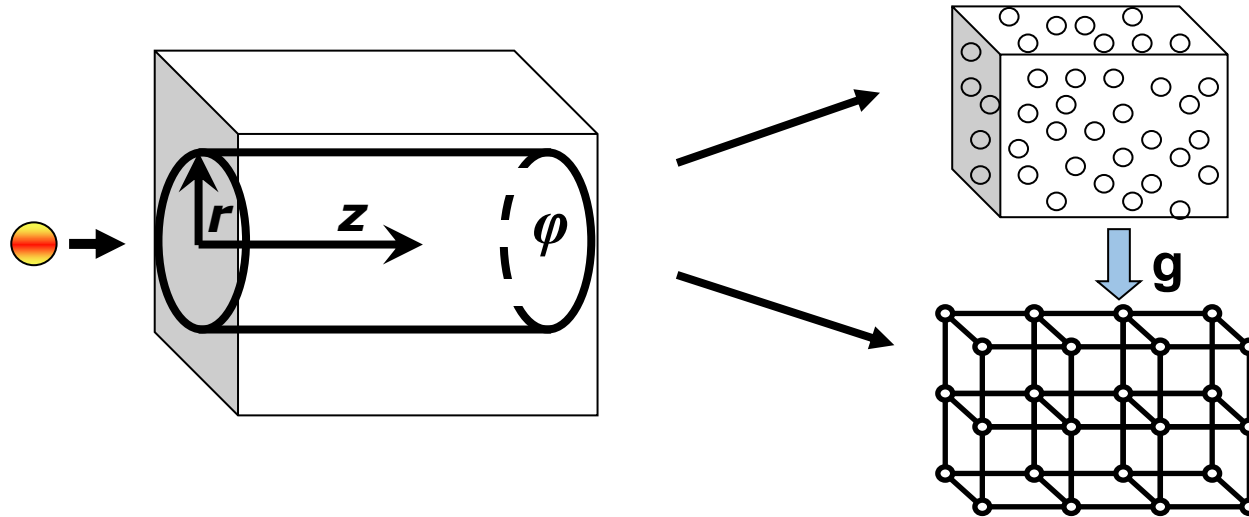


Рис. 1.1. Схема модели термического пика при облучении материала (мишени).

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

$$C_i \frac{\partial T_i}{\partial t} = \lambda_i \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial T_i}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 T_i}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2 T_i}{\partial z^2} \right) + g(T_e - T_i) + A_i(r, \varphi, z, t)$$

$$A_{e,i}(r, \varphi, z, t) = f_1(r) f_2(\varphi) f_3(t) S_{inel, ph}(z)$$

Учет фазовых переходов

$$T_i(t, \xi(t)) = T_{nl} = \text{const} > 0, \quad t > 0$$

$$\Phi(T_i(\vec{r}, t)) = \Phi(\vec{r}, t).$$

$$((\lambda_{i1} \text{grad } T_{i1} - \lambda_{i2} \text{grad } T_{i2}), \text{grad } \Phi) + \rho L \frac{\partial \Phi}{\partial t} = 0,$$

$$H(T_i) = \int_{T_0}^{T_i} [C_i(x) + \rho L \delta(x - T_{\text{melt}})] dx$$
$$C_i(T_i) = \begin{cases} C_{i,1}(T_i) & \text{при } T_0 < T_i < T_{\text{melt}} \\ C_{i,2}(T_i) & \text{при } T_{\text{melt}} < T_i \end{cases}$$

$$\frac{\partial H}{\partial t} = \lambda_i \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial T_{0,i}}{\partial r} \right) + \frac{\partial^2 T_{0,i}}{\partial z^2} \right) + g(T_{0,e} - T_{0,i}) + A_{0,i}(r, z, t).$$

Метод численного решения

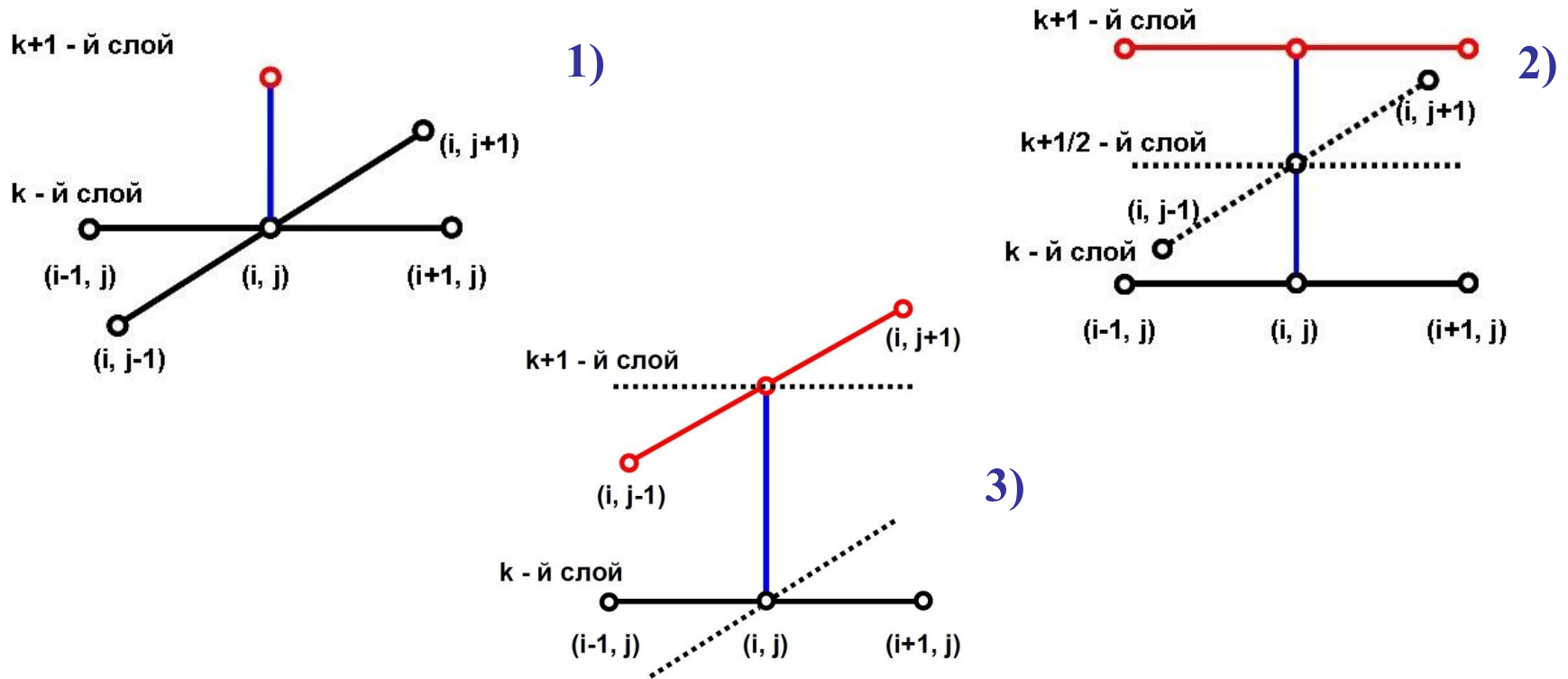


Рис. 1.2. Схематический рисунок явной схемы (1), метода переменных направлений (2)⁷ и явно-неявная разностная схема (3)⁸

⁷А.А. Самарский, А.В. Гулин. Численные методы. М.: Наука, 1989, 432с.

⁸Яненко Н.Н. Метод дробных шагов решения многомерных задач мат. физики // Наука - Новосибирск, 1967.

Результаты

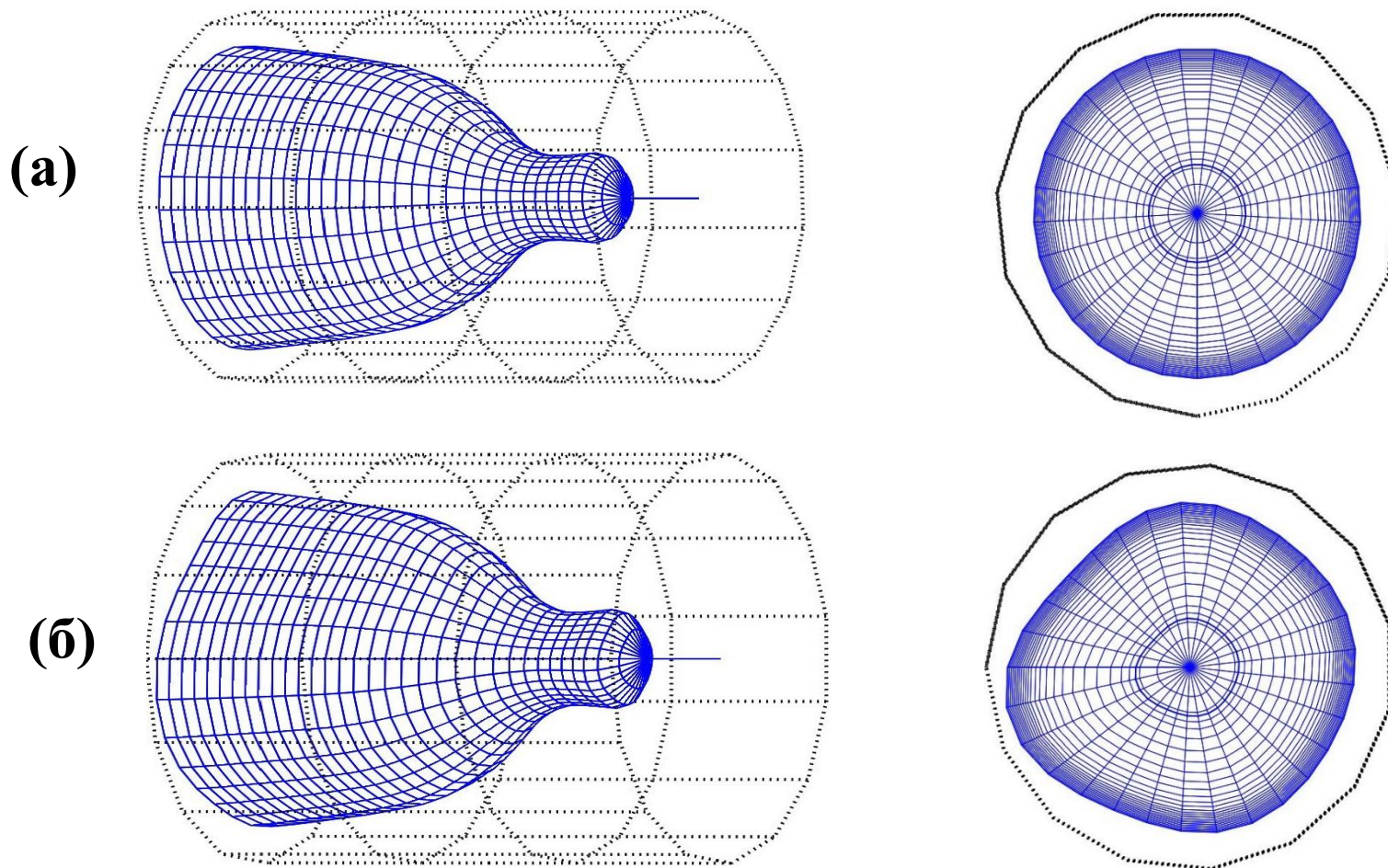


Рис. 1.3. Образование изотермической поверхности с аксиальной симметрией (а) и в отсутствии аксиальной симметрии (б) а также ее проекция на поверхность $z=0$ (размеры цилиндра: радиус $140\text{\AA}$, высота $200000\text{\AA}$, $3.0 \cdot 10^{-14}$ с).

Численные результаты задачи: облучение никеля тяжелыми ионами урана с энергией 700 МэВ

Расчеты в рамках модели ТП проводились с постоянными физическими параметрами в расчетной области с размерами $R_{max}=0,05$ мкм, $Z_{max}=20$ мкм.

Горизонтальная штрихованная линия показывает температуру плавления Ni, $T_{пл}=1725K$

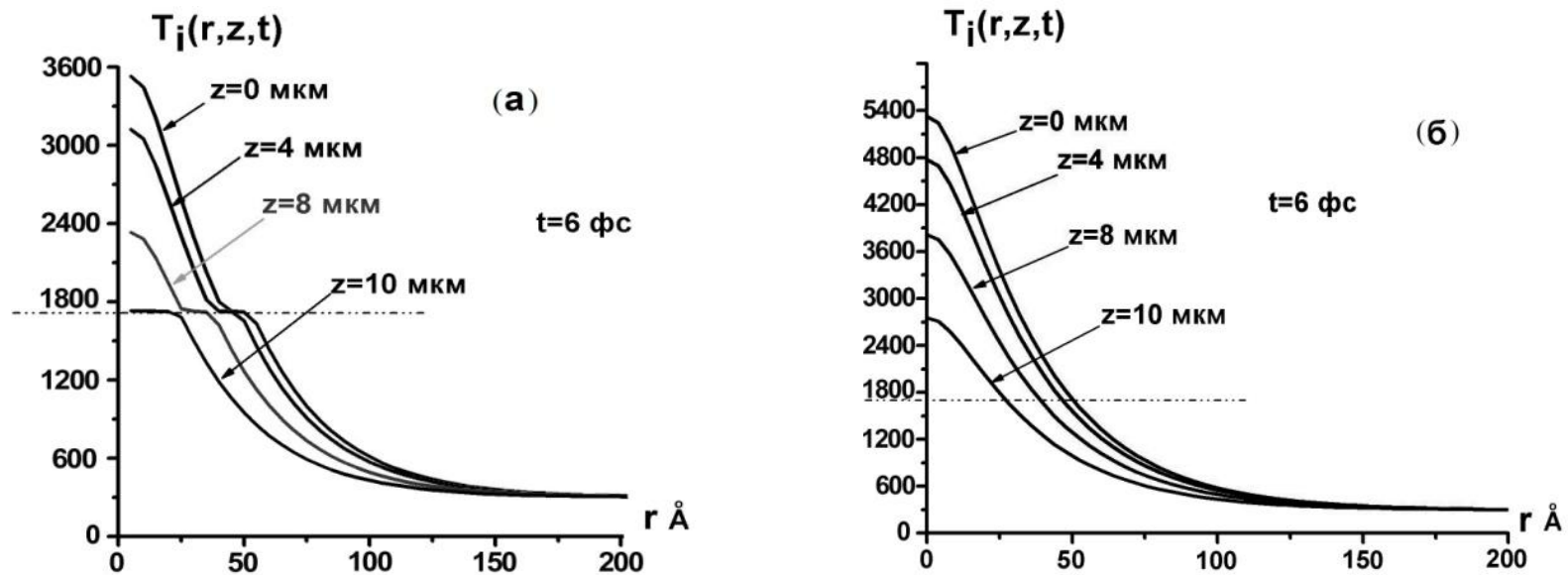
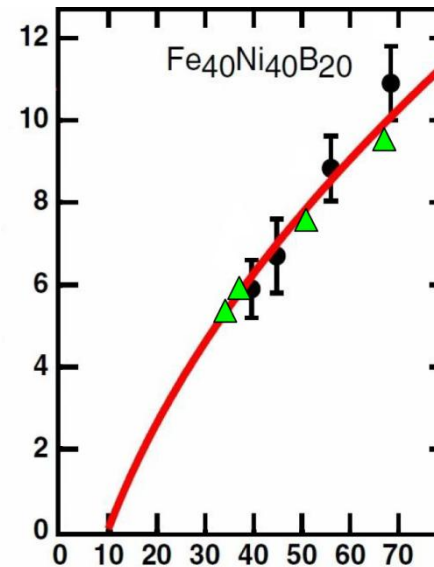
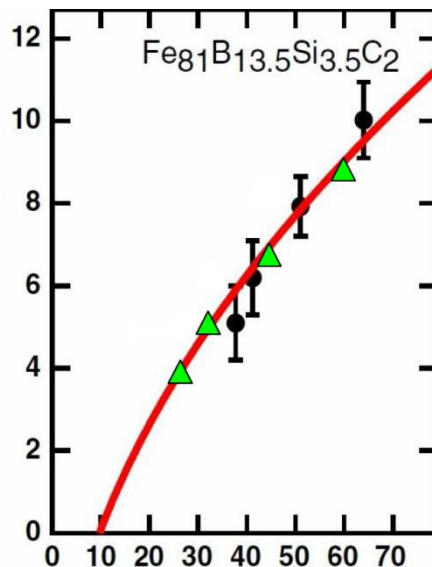
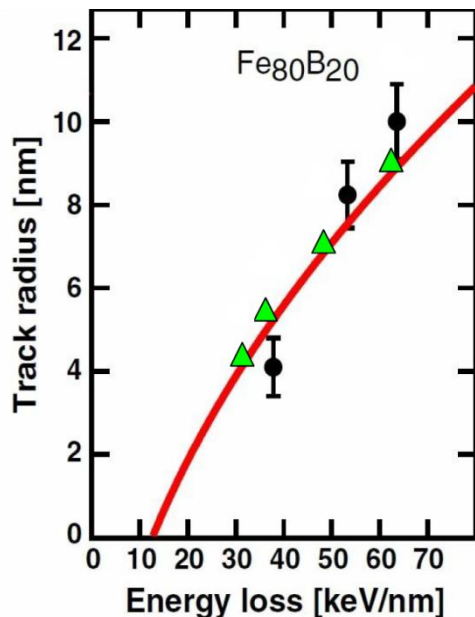


Рис. 1.4. Радиальные профили температур кристаллической решетки на разных глубинах $z=0,4,8,10$ мкм в момент времени $t=6$ фс ($t=6 \cdot 10^{-15}$ с) с учетом (а) и без учета (б) фазового перехода.

A. Barbu, A. Dunlop, A. Hardouin et al. Microstructural modifications induced by swift ions in the NiTi intermetallic compound // Nucl. Instrum. Meth. B 145 354 (1998).

Моделирование образования треков в аморфных сплавах железа при облучении тяжёлыми ионами высоких энергий



- ▲ Численные результаты [1,3]
- Экспериментальные данные [2]
- Численные результаты в работе [2]

[1] I.V. Amirkhanov, I.A.Yu. Didyk, I.V. Puzynin, et. al. Modeling the track formation in amorphous iron alloys exposed to high-energy heavy ions// Books of abstracts of the international conference MMCP2013 (2013) 35.

[2] M.D. Rodriguez, B. Afra, C. Trautmann, et. al. Morphology of swift heavy ion tracks in metallic glasses// Journal of Non-Crystalline Solids 358 (2012) 571-576.

[3] Амирханов И.В., Дидык А.Ю., Пузынин И.В. и др. Моделирование образования треков в аморфных сплавах железа при облучении тяжёлыми ионами высоких энергий // Вестник РУДН. Серия Матем. Информатика. Физика. 2014. №2. с. 316-319.

Расчётные и экспериментальные радиусы треков

Мишень+ион	Радиус расплав- ленной области без учёта фазового перехода, нм	Радиус расплав- ленной области с учётом фазового перехода, нм	Экспери- мен- тальные оценки
Fe ₈₀ B ₂₀ + ²³⁸ U 8.2МэВ/нуклон	≈ 11.5	≈ 9.0	9.8 ± 0.3
Fe ₈₁ B _{13.5} Si _{3.5} C ₂ + ²³⁸ U 8.2МэВ/нуклон	≈ 11.5	≈ 9.0	9.8 ± 0.3
Fe ₄₀ Ni ₄₀ B ₂₀ + ²³⁸ U 8.2МэВ/нуклон	≈ 12.3	≈ 9.5	10.2 ± 0.3
Fe ₈₀ B ₂₀ + ¹⁵² Sm 11.1МэВ/нуклон	≈ 6.5	≈ 5.1	4.0 ± 0.3
Fe ₈₁ B _{13.5} Si _{3.5} C ₂ + ¹⁵² Sm 11.1МэВ/нуклон	≈ 6.5	≈ 5.1	4.8 ± 0.3
Fe ₄₀ Ni ₄₀ B ₂₀ + ¹⁵² Sm 11.1МэВ/нуклон	≈ 7.8	≈ 6.2	5.2 ± 0.3
Fe ₈₀ B ₂₀ + ¹⁹⁷ Au 11.1МэВ/нуклон	≈ 8.5	≈ 7.3	7.0 ± 0.3
Fe ₈₁ B _{13.5} Si _{3.5} C ₂ + ¹⁹⁷ Au 11.1МэВ/нуклон	≈ 8.5	≈ 7.3	7.0 ± 0.3
Fe ₄₀ Ni ₄₀ B ₂₀ + ¹⁹⁷ Au 11.1МэВ/нуклон	≈ 9.0	≈ 7.6	7.3 ± 0.3

Таблица 1.1. Результаты расчетов для различных аморфных сплавов, демонстрирующие изменения размеров области плавления с учетом и без учета фазовых переходов.

Вывод

По результатам расчета облучения никеля ионами урана с энергией 700МэВ получены результаты расчетов :

- размеры области, где происходит плавление следующие: радиус $r_{\max} \sim 75 \text{ \AA}$, глубина $z_{\max} \sim 1.337 \times 10^5 \text{ \AA}$. Аналогичная область для модели, где не учитывается фазовый переход: $r_{\max} \sim 115 \text{ \AA}$, глубина $z_{\max} \sim 1.4 \times 10^5 \text{ \AA}$. В этих областях могут происходить структурные изменения (треки, дефекты, разломы) в облучаемых материалах и может привести к изменению физических свойств.

По результатам моделирования облучения аморфных сплавов тяжелыми ионами высоких энергий, получены результаты расчетов:

- размеры области, где происходит плавление следующие: $\text{Fe}_{80}\text{B}_{20}$ и $\text{Fe}_{81}\text{B}_{13.5}\text{Si}_{3.5}\text{C}_2$ радиус $r_{\max} \sim 90 \text{ \AA}$, $\text{Fe}_{40}\text{Ni}_{40}\text{B}_{20}$ радиус $r_{\max} \sim 98 \text{ \AA}$. Аналогичная область для модели, где не учитывается фазовый переход: $\text{Fe}_{80}\text{B}_{20}$ и $\text{Fe}_{81}\text{B}_{13.5}\text{Si}_{3.5}\text{C}_2$ радиус $r_{\max} \sim 115 \text{ \AA}$, $\text{Fe}_{40}\text{Ni}_{40}\text{B}_{20}$ радиус $r_{\max} \sim 123 \text{ \AA}$.

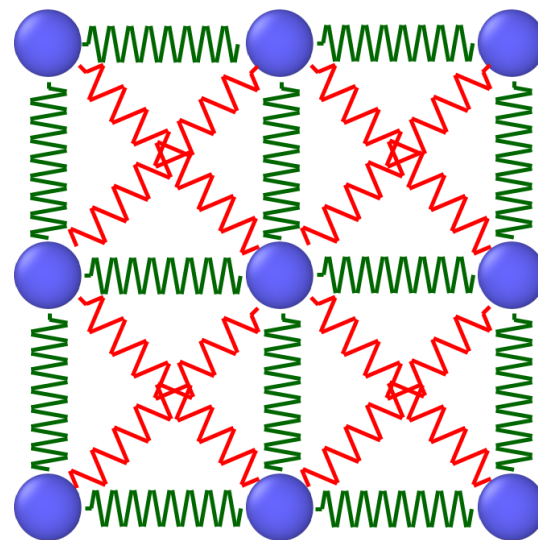
В целом в обеих задачах (облучение никеля и аморфных сплавов) расчёты подтверждают, что полученные нами оценки размеров областей, где происходят процессы плавления, с учётом фазовых переходов лучше согласуются с приведёнными в [1][2], экспериментальными оценками характерных размеров треков.

1) Barbu, A. Dunlop, A. Hardouin et all. Microstructural modifications induced by swift ions in the NiTi intermetallic compound // Nucl. Instrum. Meth. B 145 354 (1998).

2) M.D. Rodriguez, B. Afra, C. Trautmann, et. al. Morphology of swift heavy ion tracks in metallic glasses// Journal of Non-Crystalline Solids 358 (2012) 571-576.

$$m_i \frac{d^2 r_i}{dt^2} = \vec{f}_i \quad (1 \leq i \leq N)$$

$$\vec{f}_i = - \frac{\partial U(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N)}{\partial \vec{r}_i} + \vec{f}_i^{ex}$$



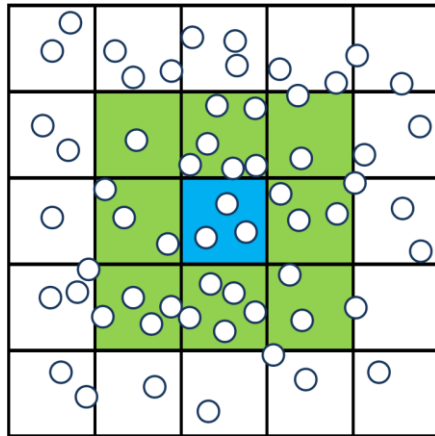
- + программные пакеты (LAMMPS, DL_POLY и т.д.)
- + структура, температура, давление, и физические свойства

Метод Верле

$$\vec{f}_i = -\vec{\nabla}_i \sum_j U(r_{ij})$$

$$\vec{r}_i(t + \Delta t) = \vec{r}_i(t) + \vec{v}_i(t)\Delta t + \frac{a_i(t)}{2}\Delta t^2 \quad a(t + \Delta t) = \frac{f(t + \Delta t)}{m}$$

$$v(t + \Delta t) = v(t) + \frac{a(t + \Delta t) + a(t)}{2}\Delta t$$



Численные методы для МД

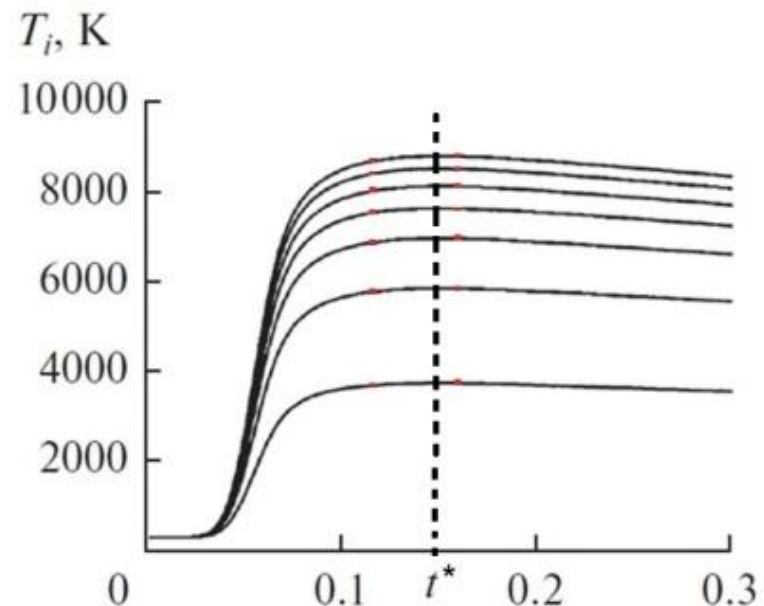
Метод связанных ячеек
(Cell Linked-Lists algorithm):
 $O(N)$

Verlet L. Computer experiments on classical fluids. I. Thermodynamical properties of Lennard-Jones molecules. // Phys. Rev.-1967.- v.159 N.1- p.98-103.

Последовательное применение модели термического пика и метода молекулярной динамики

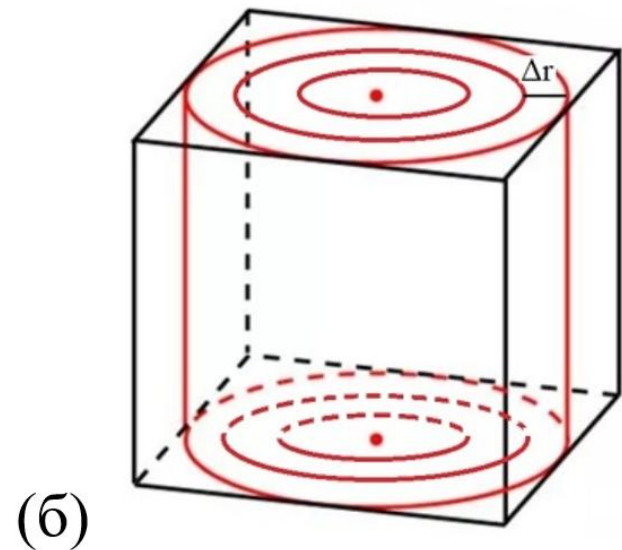
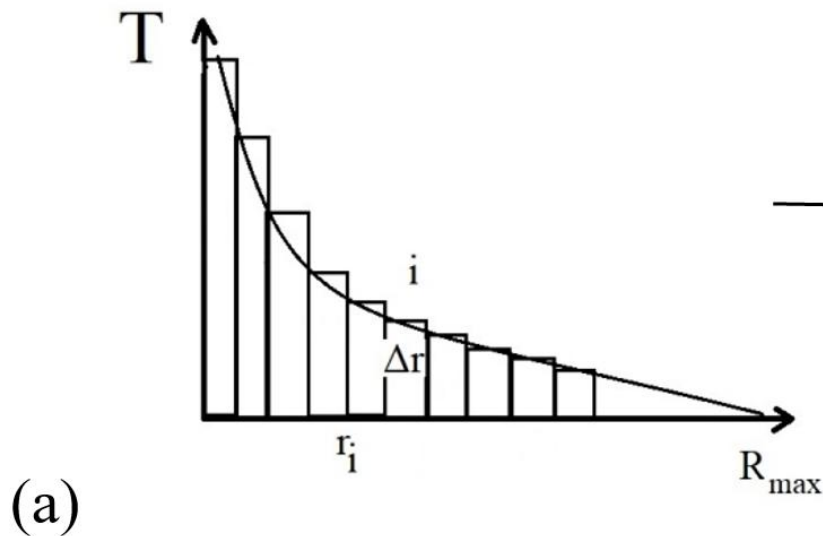
Моделирование процессов, возникающих в никелевой мишени, облучаемой ионами урана с энергией в диапазоне 100-700 МэВ. Модель термического пика используется для получения начальных условий, которые имитируют воздействие тяжелого иона высокой энергии на молекулярно-динамическую систему никеля. Дальнейшая эволюция системы исследуется методом молекулярной динамики.

Зависимость температуры в точке ($r=0, z=0$) на поверхности никеля от времени для энергий 100–700 МэВ с шагом 100 МэВ. Максимальная температура никеля для всех значений энергии облучения достигается для $t^* \sim 1.5 \times 10^{-14}$ с (показано пунктирной линией).



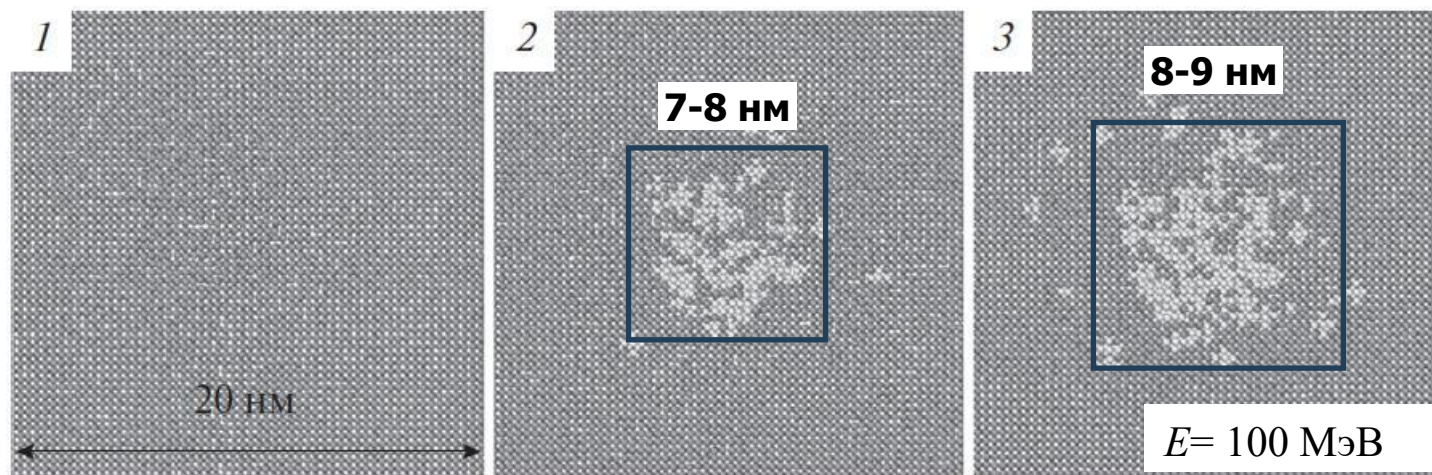
Основная идея метода

1. Определить момент $t=t^*$ времени, в котором температура в точке $(r=0, z=0)$ облучаемой поверхности мишени достигает максимума.
2. При $t=t^*$ вычислить температуру на поверхности мишени как функцию от радиуса с шагом Δr .
3. Определить для расчетной области МД - моделирования семейство вложенных подобластей трубчатой конфигурации с общей осью и толщиной стенки .
4. Каждой подобласти приписать начальную постоянную температуру путем ступенчатой аппроксимации функции, вычисленной в п. 2.



Результаты

а)



б)

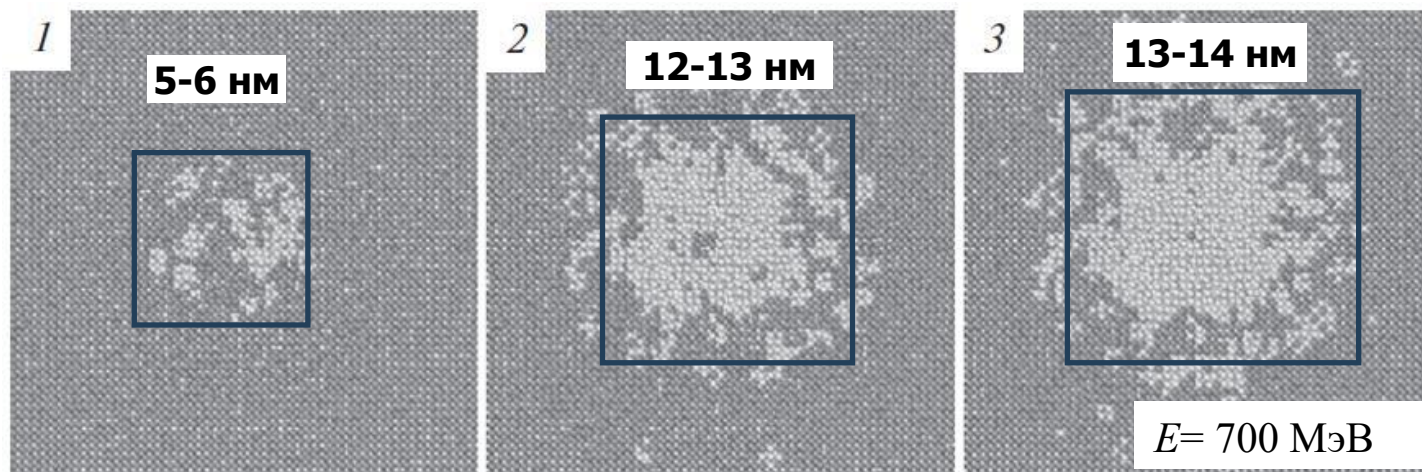


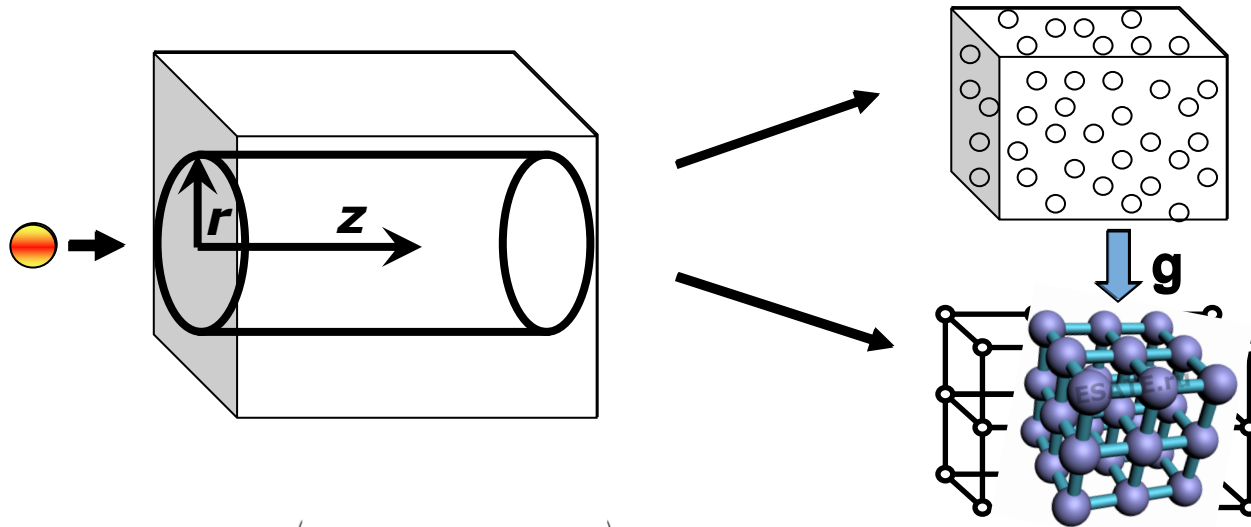
Рис. Структурные изменения на поверхности никеля в моменты времени: 1) $t = 2 \times 10^{-14} \text{ с}$, 2) $t = 4 \times 10^{-14} \text{ с}$, 3) $t = 6 \times 10^{-14} \text{ с}$ для энергии иона урана 100 и 700 МэВ.

Вывод

Проведены исследования структурных изменений в никеле при облучении тяжелыми ионами урана с энергией 100-700 МэВ. По результатам моделирования получены результаты расчетов и следующие выводы:

- Размеры области, где происходит структурные изменения для различных временах ($t= 2 \times 10^{-14} \text{с}$, 2) $t=4 \times 10^{-14} \text{с}$, 3) $t=6 \times 10^{-14} \text{с}$, 4) $t=8 \times 10^{-14} \text{с}$) следующие: для $E= 100 \text{ МэВ}$ радиус $D_{\text{max}} \sim 13 \text{ нм}$, для $E= 700 \text{ МэВ}$ радиус $D_{\text{max}} \sim 20 \text{ нм}$.
- Подход, предложенная в работе, подходит для описания структурных изменений в поверхностных слоях облучаемого материала.
- При увеличении энергии облучающих ионов растет плотность структурных изменений поверхности облучаемого образца, причем размеры областей структурных изменений сопоставимы в одинаковые моменты времени и слабо зависят от энергии облучения.

Совместное применение модели термического пика и метода молекулярной динамики



$$C_e(T_e) \frac{\partial T_e}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left(K_e(T_e) \frac{\partial T_e}{\partial z} \right) - G(T_e - T_l) + S(z, t),$$

$$m_i \frac{d^2 \mathbf{r}_i}{dt^2} = \mathbf{F}_i + \xi m_i \mathbf{v}_i^T,$$

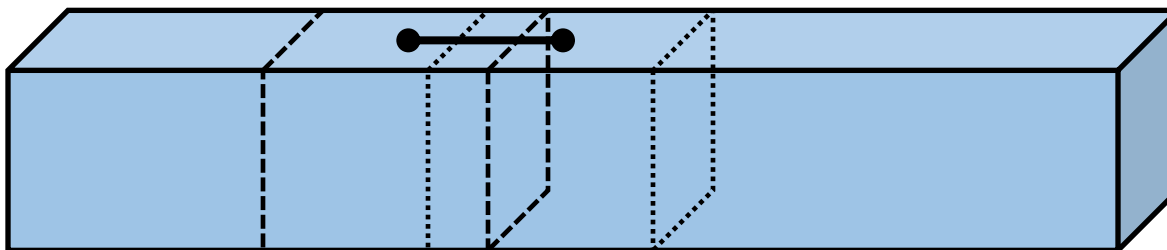
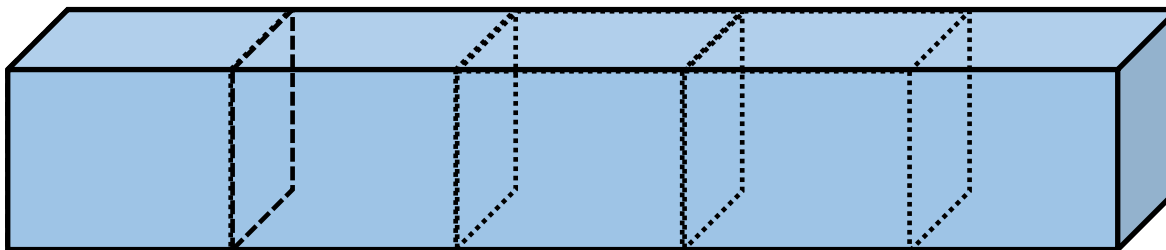
$$\xi = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n G V_N(T_e^k - T_l) \bigg/ \sum_i m_i (\mathbf{v}_i^T)^2$$

Численные методы для ТП-МД

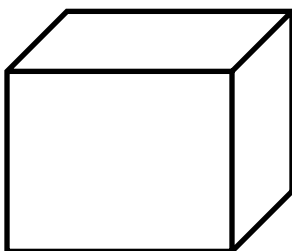


ТП

вычисления температуры



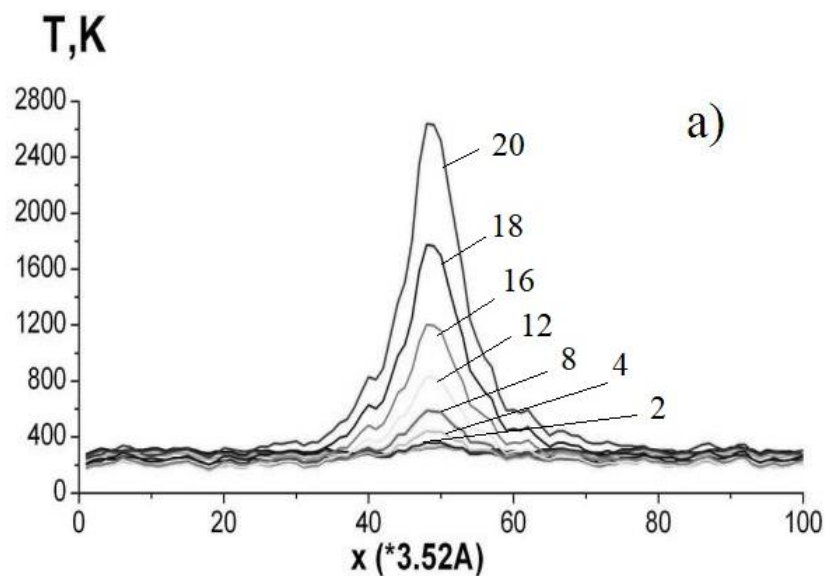
МД



количество частиц:
100-1000

Результаты

ТП+МД



ТП

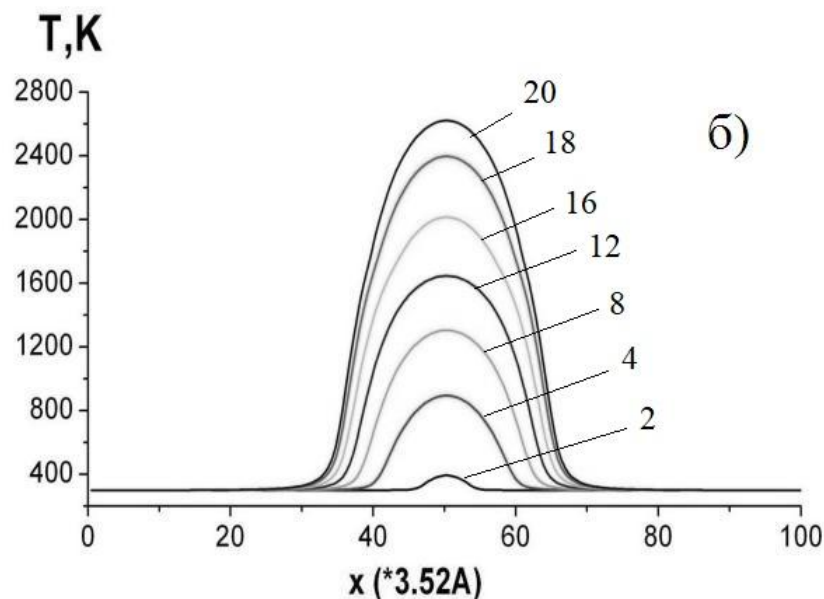
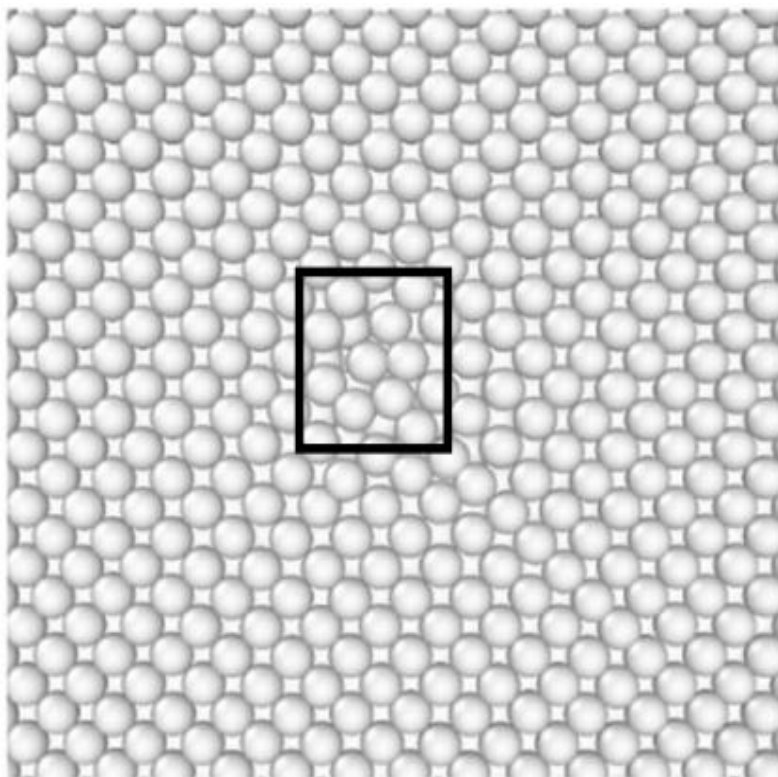


Рис. 3.1. Зависимость от времени температуры кристаллической решетки в моменты времени $t = 2, 4, 8, 12, 16, 18, 20$ пс на поверхности никелевой мишени при облучении ионами урана с энергией 700 МэВ для ТП+МД (а) и в рамках модели ТП (б).

Результаты

(a)



(б)

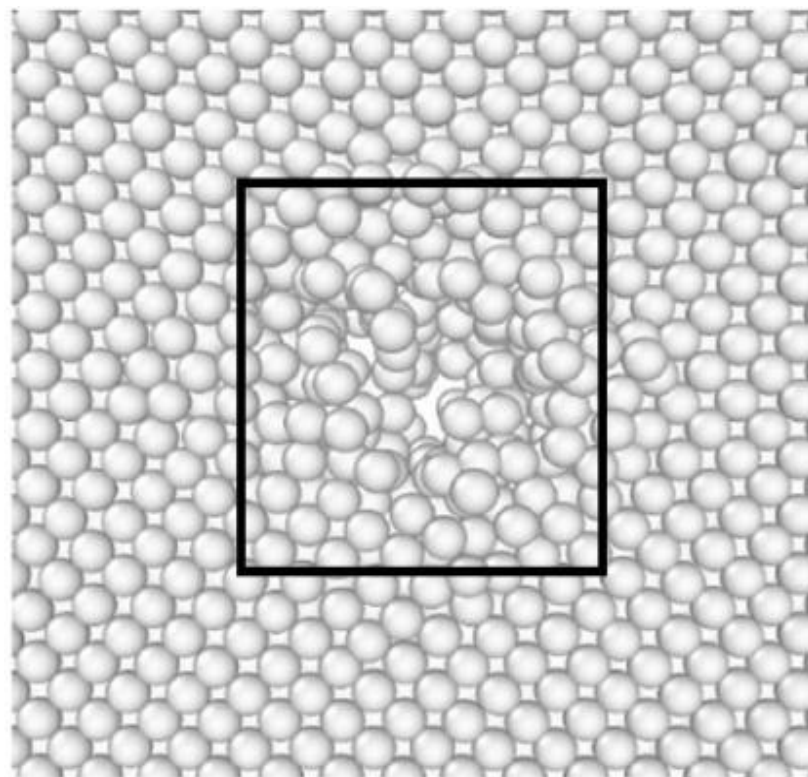


Рис. 3.2. Разрушения кристаллической решетки в моменты времени $t_1 = 300\text{фс}$ для параметра $g = 0.5 g_{\text{Ni}}$ (a) и $g = 2 g_{\text{Ni}}$ (б).

Результаты

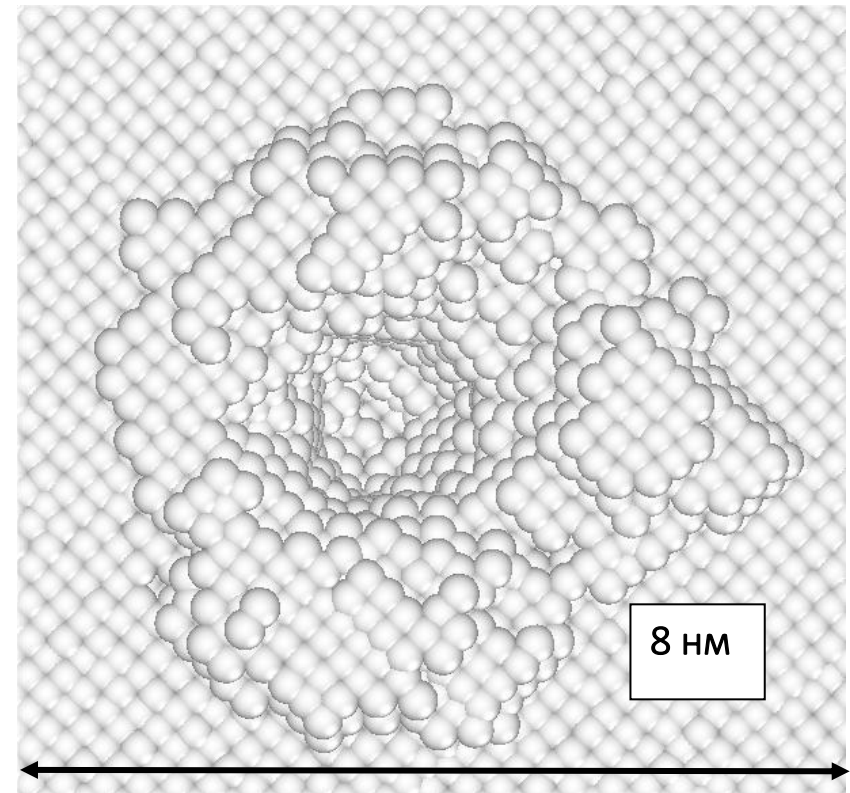
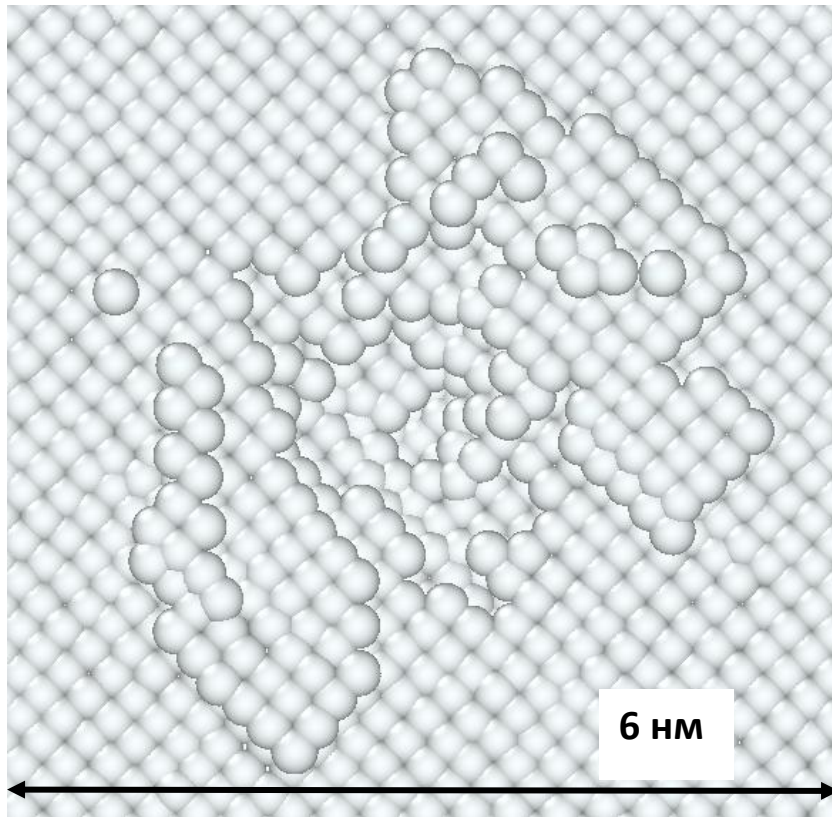


Рис. 3.3. Структура поверхности мишени никеля при облучении ионами урана с энергией 700 МэВ в момент времени 20 пс для $g=4.05 \cdot 10^{12} \text{ ВТ}/(\text{см}^3 \text{ К})$ (а) и $g=8.1 \cdot 10^{12} \text{ ВТ}/(\text{см}^3 \text{ К})$ (б).

Вывод

В рамках континуально-атомистической модели проведено моделирования взаимодействия тяжелых ионов высоких энергий с металлическими мишенями. По результатам моделирования получены результаты расчетов и следующие выводы:

- Размеры области, где происходит разрушения кристаллической решетки в моменты времени $\underline{t_1} = 100\text{фс}$ и $\underline{t_2} = 300\text{фс}$ следующие: для параметра $\underline{r_0} = 0.5\text{нм}$ радиус $\mathbf{D_{max}} \sim 6 \text{ нм}$, для параметра $\underline{r_0} = 1 \text{ нм}$ радиус $\mathbf{D_{max}} \sim 7 \text{ нм}$, для параметра $\underline{g} = 0.5g_{\text{Ni}}$ радиус $\mathbf{D_{max}} \sim 2 \text{ нм}$, для параметра $\underline{g} = 2g_{\text{Ni}}$ радиус $\mathbf{D_{max}} \sim 7 \text{ нм}$.
- Выбор коэффициента электрон-фононного взаимодействия определяется сравнением с экспериментальными данными, так как соответствует количеству переданной энергии от электронов к решетке.
- Реализованный программный комплекс континуально-атомистический подход позволяет исследовать более детальную картину.

Список научных работ за период с 2022 по 2025 гг. (данные на 16.07.2025)

Публикации в рецензируемых журналах - 8

Материалы научных мероприятий - 13

Препринт - 5

Список публикаций

1. I. Hristov, R. Hristova, I. Puzynin, T. Puzynina, Z. Sharipov, and Z. Tukhliev. Newton's Method for Computing Periodic Orbits of the Planar Three-Body Problem // **Advanced Computing in Industrial Mathematics**, стр.107-118, 2025г.
2. I. Hristov, R. Hristova, T. Puzynina, Z. Sharipov, Z. Tukhliev. Numerical search for three-body periodic free-fall orbits with central symmetry // **Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation** (Q1), стр.Article 109066, 2025г.
3. I. V. Amirkhanov, I. Sarkhadov, Z. K. Tukhliev, and H. Gafurov. Simulation of Laser Ablation of Materials within the Thermal Spike Model // **Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования**, ISSN:0207-3528, Изд: Академиздатцентр, том 18, стр.348-353, 2024г.
4. I. Hristov, R. Hristova, I. Puzynin, T. Puzynina, Z. Sharipov, Z. Tukhliev. Searching for New Nontrivial Choreographies for the Planar Three-Body Problem // **Physics of Particles and Nuclei**, ISSN:ISSN 1063-7796, Изд:Pleiades Publishing, Ltd., том 55, стр.495–497, 2024г.

5. Hristov, I., Hristova, R., Puzynin, I., Puzynina, T., Sharipov, Z., Tukhliev, Z. A Database of High Precision Trivial Choreographies for the Planar Three-Body Problem // **Lecture Notes in Computer Science**, ISSN:0302-9743, Изд:Springer, том 13858, стр.171-180, 2023г.
6. I.Hristov, R.Hristova, S.Dimova, P.Armyanov, N.Shegunov, I.Puzynin, T.Puzynina, Z.Sharipov, Z.Tukhliev. Parallelizing Multiple Precision Taylor Series Method for Integrating the Lorenz System // **Springer, Cham. Advanced Computing in Industrial Mathematics**. BGSIAM 2020. Studies in Computational Intelligence, том vol 1076, 2023г.
7. З.А. Шарипов, Б. Батгэрэл, И.В. Пузынин, Т.П. Пузынина, И.Г. Христов, Р.Д. Христова, З.К. Тухлиев. Моделирование процессов взаимодействия нанокластеров меди с металлическими мишенями со структурой реальных кристаллов с дефектами типа пор // **Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования**, ISSN:0207-3528, Изд:Академиздатцентр, стр.19-24, 2022г.
8. I. Hristov, R. Hristova, I. Puzynin, T. Puzynina, Z. Sharipov, Z. Tukhliev. New Families of Periodic Orbits for the Planar Three-Body Problem Computed with High Precision // **CEUR Workshop Proceedings**, ISSN:1613-0073, Изд:CEUR Workshop Proceedings, том Vol-3191, стр.45-50, 2022г.

Список конференций

1. Всероссийская конференция «Информационно-телекоммуникационные технологии и математическое моделирование высокотехнологичных систем» РУДН, Москва (2022, 2024, 2025)
2. Международная Тулиновская конференции по физике взаимодействия заряженных частиц с кристаллами, МГУ, Москва (2022, 2023, 2024, 2025)
3. Третья Международная Конференция "Физика конденсированных состояний" (ФКС2023) посвященная 60-летию ИФТТ РАН Черноголовка, Россия 2023
4. International Conference Mathematical Modeling and Computational Physics, 2024 (MMCP2024)". (MMCP2024, 20-25 October 2024, A.I. Alikhanian National Science Laboratory, the Yerevan State University, and the Institute for Informatics and Automation Problems of the National Academy of Sciences of Armenia, Yerevan, Armenia)
5. Международная конференция Математика. Компьютер. Образование. Симпозиум с международным участием «Биофизика сложных систем. Вычислительная и системная биология. Молекулярное моделирование» 2022

План научных исследований

- 1) Моделирование процессов облучения металлических мишеней тяжелыми ионами высоких энергий и нанокластерами на основе континуально-атомистического подхода. Разработка алгоритмов и параллельных программ высокой точности для малочастичных систем.

Сотрудничество: ЛЯР Мирзаев М.Н.; ЛЯП Попов Е.; ФМИ-СУ, Болгария, Христов И.Г., Христова Р.Д.; МГУНиТ, Монголия, Б. Батгэрэл

- 2) Продолжение работ по разработке программного комплекса для геометрической юстировки детекторов STS и GEM эксперимента BM@N.

Сотрудничество: ЛФВЭ Герценбергер К. В. , Мерц С. П.

- 3) Разработка новых подходов и методов для исследования взаимодействия аттосекундных лазерных импульсов с веществом. Моделирование лазерной абляции материалов в рамках модели термического пика в образцах конечной толщины.

Диссертация подготовлена

Тема: «Моделирования процессов взаимодействия тяжелых ионов
высоких энергий с металлами, на основе развития континуально-
атомистического подхода»

на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук
по специальности

1.2.2 – математическое моделирование, численные методы
и комплексы программ

Работа выполнена в
Лаборатории информационных технологий имени М.Г. Мещерякова
Объединенного института ядерных исследований

по теме **06-6-1119-2024/2026** «Методы, алгоритмы и программное обеспечение
для моделирования физических систем, математической обработки и
анализа экспериментальных данных»

- **Проект 20-51-44001 Монг_а** совместно РФФИ и Министерство образования, культуры, науки и спорта Монголии «Разработка континуально-атомистических моделей для исследования разномасштабных процессов в сложных системах физики»
- **Программа сотрудничество ОИЯИ-Болгария** за 2019 - 2023 гг «Развитие современных технологий параллельного программирования для моделирования разномасштабных динамических процессов»

Спасибо за внимание!