

УДК 539.16.04:577.37

ТЕРМОМЕХАНИЧЕСКОЕ ВОЗДЕЙСТВИЕ МЕДЛЕННЫХ НЕЙТРОНОВ НА БИОГЕННЫЕ МАТЕРИАЛЫ

А.И. Калиниченко, В.В. Товстяк

Харьковский Национальный университет, пл.Свободы,4, 61077 Харьков, Украина

E-mail: kalinichenko@univer.kharkov.ua

Поступила в редакцию 17 февраля 2004 г.

Теоретически исследуется образование малых перегретых областей – термоупругих пиков (ТУП) - вблизи точек рассеяния нейтронов с энергией $E \sim 0.5 \div 5$ кэВ в биогенных материалах, обусловленное энергетическими потерями ядер отдачи. На основе компьютерного моделирования процесса передачи энергии от ядра отдачи атомам вещества и учета релаксационных процессов, определяются время возникновения и жизни, форма и размер ТУП, образуемых различными ядрами отдачи. Обсуждается возможность термодинамического описания состояния вещества в ТУП. Определяются температура перегрева и термоупругое давление в ТУП. Проводится классификация ТУП по геометрическим признакам, величине перегрева и давления в них. Исследуется импактный механизм генерации импульса давления связанный с передачей веществу ТУП импульса ядра отдачи. Обсуждаются характеристики зоны биологического действия вокруг ТУП, в которой материал претерпевает необратимые изменения.

КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА: нейтрон, упругое рассеяние, ядро отдачи, пробег иона, термоупругий пик, разрушение

Известно, что облучение нейтронами живой материи приводит к радиационному поражению, являющемуся следствием физико-химических изменений, происходящих в биологическом субстрате (образование ионов, высокоактивных радикалов, возбуждение и распад молекул и т.д.) Большую роль играет наведенная радиация за счет образования нестабильных ядер под действием нейтронов. Однако возможно и непосредственное механическое разрушение структур биообъекта, вызываемое действием механических напряжений, возникающих в малых областях вещества, содержащих энергию и импульс, потерянные нейтронами. Термоупругий механизм возбуждения акустических колебаний частицами излучения, предложенный впервые Г.А. Аскарьяном [1], подробно рассматривался применительно к пучкам электронов, протонов и гамма квантов, а также к одиночным ионам. Результаты большого числа теоретических и экспериментальных исследований в обобщенном и систематизированном виде представлены в [2,3,4]. В то же время, почти отсутствуют исследования, посвященные акустическому эффекту нейтронов. Это объясняется трудностью экспериментальной работы с этим видом излучений: отсутствием достаточно мощных, короткоимпульсных и остронаправленных источников нейтронов, проблемами радиационной защиты, слабостью акустического отклика и т.д. Отсутствуют также и детальные исследования термоакустического эффекта одиночных нейтронов, хотя ранее [2,4] уже отмечалась возможность генерации одиночными нейтронами мощных термоакустических импульсов, превосходящих по величине предел прочности твердой мишени. Такой вывод в первую очередь связывался с возможностью передачи в акте взаимодействия значительной части энергии нейтрона. Однако обоснованная оценка величины возникающих механических эффектов невозможна без знания пространственно-временных характеристик области, где локализуется переданная от нейтрона энергия. Величина возникающей плотности поглощенной энергии/импульса и темп ее релаксации определяет выбор доминирующего механизма генерации механических напряжений (термоупругого, пузырькового, динамического [1,2]) и возможность необратимых изменений материала мишени под действием таких напряжений.

Представляется целесообразным начать анализ термомеханического воздействия нейтронов на биогенные материалы, из которых строится живая материя, именно с нейтронов малых и промежуточных энергий $E_n \sim 1$ кэВ, а не, скажем, с генераторных нейтронов с энергией 14 МэВ. Во-первых, такие нейтроны практически не вызывают ядерных превращений легких элементов ^1H , ^{12}C , ^{14}N , ^{16}O с образованием радиоактивных изотопов, осуществляющих вторичное радиационное поражение, что затруднило бы исследование облученных образцов, в частности, выделение в чистом виде искомого эффекта. Во-вторых, нейтроны именно таких энергий продуцируют в объеме мишени ядра отдачи с энергией $\sim 100 \div 200$ эВ, которые, в свою очередь, приводят к возникновению нанометровых перегретых областей - термоупругих пиков - с температурой $\geq 10^3$ К и давлением ≥ 1 ГПа [5].

В настоящей работе теоретически исследуется образование термоупругих пиков (ТУП) вблизи точек рассеяния нейтронов в биогенных материалах. Определяются времена возникновения и жизни, форма и размер ТУП, образуемых различными ядрами отдачи. Проводится классификация возникающих ТУП по геометрическим признакам. Обсуждается возможность термодинамического описания состояния вещества в ТУП. Определяются температура перегрева и избыточное термоупругое давление в ТУП. Анализируются и

сравниваются различные механизмы возникновения объемных сил. В частности, исследуется импактный механизм, связанный с передачей веществу ТУП импульса ядра отдачи. Обсуждаются характеристики зоны биологического действия вокруг ТУП, в которой материал мишени претерпевает необратимые изменения.

ОПИСАНИЕ МОДЕЛИ

Ядра отдачи

Времена, характерные для взаимодействия нейтрона с веществом мишени, значительно меньше его периода полураспада $T_{1/2} \approx 600$ с, и в дальнейшем рассмотрении нейтрон можно считать стабильной частицей. Рассмотрим взаимодействие нейтронов малых и умеренных энергий ($0,5 \text{ кэВ} \leq E_n \leq 5 \text{ кэВ}$) с ядрами легких ($A \leq 40$) элементов, преобладающих в атомном составе биогенных материалов. В этой области энергий и атомных весов отсутствует резонансное и неупругое рассеяния и радиационный захват нейтронов (см. [6], глава 41; [7], глава 4). Дифференциальное сечение потенциального (упругого) рассеяния $d\sigma = \frac{\sigma}{4\pi} d\omega$, где $d\omega = 2\pi \sin \chi d\chi$ - элемент телесного угла в системе центра инерции, является сферически-симметричным. Полное сечение $\sigma = 4\pi R^2$, где радиус ядра R связан с радиусом нуклона r_n соотношением $R = r_n \sqrt[3]{A}$, не зависит от энергии нейтрона во всем интервале энергий, в котором выполнено условие $\frac{\hbar}{\sqrt{2m_n E_n}} \gg R$ (m_n - масса нуклона) (см. [7], глава 4).

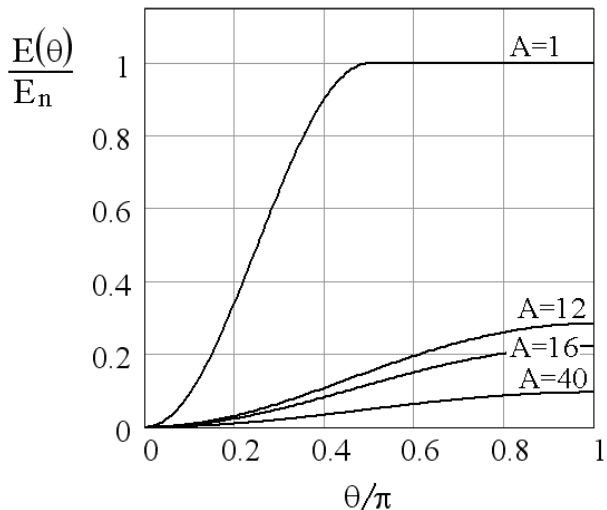


Рис. 1. Энергия, передаваемая ядрам отдачи с различными атомными весами A при упругом рассеянии нейтрона, в зависимости от угла рассеяния.

(фосфор); 0,048 (кальций). Так, ориентируясь на энергию нейтронов $E_n = 2 \text{ кэВ}$, получаем для средней энергии отдачи ядер водорода $E_H = 1 \text{ кэВ}$, кислорода $E_O = 222 \text{ эВ}$ и кальция $E_{Ca} = 96 \text{ эВ}$.

В таблице 1 приведены плотность и элементный состав некоторых распространенных биообъектов. Опущены элементы, содержание которых не превышает 1% [9].

Таблица 1. Плотность и элементный состав некоторых биообъектов

Название	Плотность, г/см ³	Элементный состав, %					
		Н	С	N	O	P	Ca
Мышцы скелетные	1,05	10	11	3	75	-	-
Трубчатая кость	1,92	3	16	4	44	10	23
Костный мозг	1,03	11	41	3	44	-	-
Селезенка	1,09	10	16	4	70	-	-
Щитовидная железа	1,05	10	12	2	75	-	-
Вода	1,0	11	-	-	89	-	-

На рис.1 приведены угловые зависимости энергии ядер отдачи некоторых элементов, входящих в состав живой материи.

Средняя энергия ядра отдачи может быть рассчитана по формуле

$$\bar{E} = \frac{1}{\sigma} \int_0^{E_{\max}} E \cdot d\sigma(E). \tag{1}$$

Учитывая, что, в приближении абсолютно твердой сферы, $d\sigma = \frac{\sigma dE}{E_{\max}}$, где

$$E_{\max} = E(\pi) = \frac{4AE_n}{(A+1)^2} \text{ - максимальная энергия,}$$

передаваемая ядру отдачи [8], получаем для средней энергии ядра отдачи с атомным весом A :

$$\bar{E}_A = \frac{E_{\max}}{2} = \frac{2AE_n}{(A+1)^2}. \tag{2}$$

Средние относительные энергии \bar{E}_A/E_n для ядер типичных элементов составляют 0,5 (водород); 0,142 (углерод); 0,124 (азот); 0,111 (кислород); 0,061

Число рассеяний нейтронов в единицу времени на ядрах элемента с атомным весом A задается выражением

$$\frac{dN_A}{dt} = J_n \sigma_A \frac{\rho \chi_A}{A m_n}, \tag{3}$$

где χ_A - весовая доля элемента с атомным номером A в материале мишени, ρ - плотность материала, J_n - плотность потока нейтронов, σ_A - полное сечение упругого рассеяния нейтрона на ядре с атомным весом A . Выражение (3) справедливо при выполнении условия $h \ll 1 \text{ см}$, когда толщина слоя вещества h

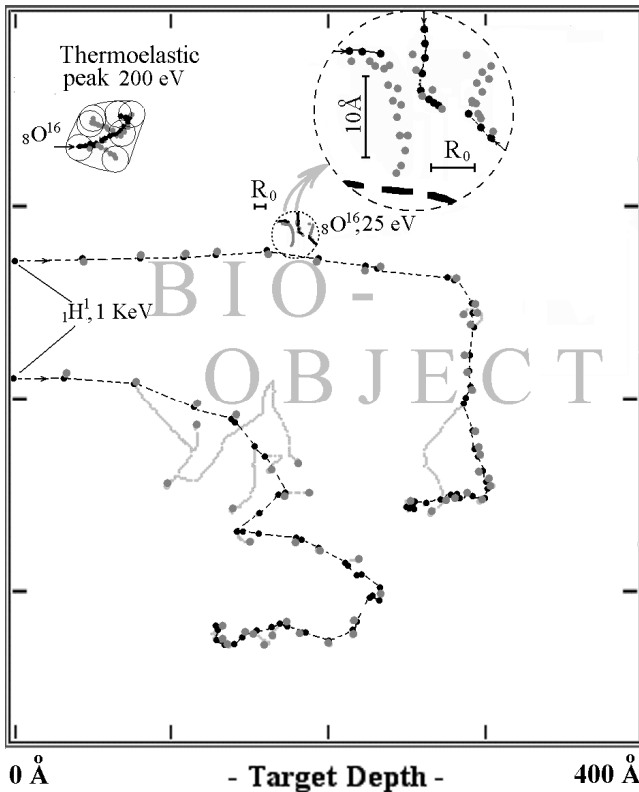


Рис. 2. Траектории ядер отдачи, полученные с помощью моделирующей программы TRIM2000 [9]. Приведены типичные траектории ядер водорода с начальной энергией $E_H=1$ КэВ и ядер кислорода с энергией $E_O=200$ эВ и $E_O=25$ эВ. R_0 – длина релаксации в температуру энергии, переданной ионам. В верхнем левом углу схематически показан термоупругий пик иона кислорода с энергией 200 эВ.

соответствующей точки столкновения. Область, в которой расположены траектории первичного иона, всех вторичных ионов и все возбужденные атомы, примем за область взаимодействия иона с веществом. Именно в этой области первоначально локализована практически вся энергия иона, причем можно считать, что энергия возбуждения ионной подсистемы первоначально локализована в конечном количестве «точечных» центров, определяемых общим количеством упругих соударений первичного и вторичных ионов с атомами мишени. Количество таких центров является случайной величиной, среднее значение $N_{ex}(E)$ которой зависит от сорта и энергии иона, а также от композиционного состава мишени. Согласно компьютерному эксперименту, проведенному при помощи компьютерного кода TRIM2000 [9], для иона кислорода в воде, $N_{ex}(25\text{эВ}) \approx 10\div 20$, $N_{ex}(100\text{эВ}) \approx 30\div 60$, и т.д.. При подсчете учитывались вторичные ионы всех сортов (в данном случае, ионы ^1H и ^{16}O).

Существенной особенностью рассеяния нейтронов в биогенных материалах, имеющих сложных элементный состав, является возникновение ядер отдачи, принадлежащих элементам с различными атомными номерами и весами. Картина взаимодействия ядра отдачи с мишенью зависит от сорта ядра, его энергии, а также от композиционного состава вещества мишени. В случае биообъекта, обогащенного ядрами водорода и кислорода, в первую очередь, необходимо рассмотреть области энерговыделения именно этих ядер отдачи.

На рис. 2 приведены типичные траектории ядер отдачи, возникающих при рассеянии нейтронов малых и промежуточных энергий в воде. Траектории получены в результате статистического моделирования процесса взаимодействия ионов с частицами вещества мишени с помощью компьютерного кода TRIM2000. Для простоты приведена только одна проекция траекторий на плоскость, в которой лежит вектор скорости первичного иона. Черные кружки показывают положение первичного иона в моменты соударений с частицами мишени. Серые кружки (линии) – положения (траектории) вторичных, третичных и т.д. ионов¹. На рис. 2 приведены картины атомных столкновений ионов кислорода с энергиями 25 эВ и 200 эВ и водорода с энергией 1 кэВ. Картины атомных столкновений, порождаемые одинаковыми ионами с одной и той же энергией, сильно разнятся, что является следствием стохастичности взаимодействия иона с частицами мишени. Траектории первичного и вторичных ионов различны как по длине, так и по форме. Поэтому, говоря о размерах области

мала, по сравнению с длиной свободного пробега нейтрона. Плотность рассеянной в единицу времени энергии, сообщенной ядрам мишени с атомным весом A , равна

$$\frac{d\varepsilon_A}{dt} = \bar{E}_A \frac{dN_A}{dt} = 2E_n J_n \sigma_A \frac{\rho \chi_A}{m_n (A+1)^2}. \quad (4)$$

Как видно из таблицы 1, в большинстве биологических объектов преобладает кислород, ядро которого является, как правило, наиболее тяжелым из всех ядер, присутствующих в композиции. Сечение упругого рассеяния нейтронов на ядрах кислорода $\sigma_O \approx 3,3$ барн, т.е. в 6 раз меньше чем на водороде (см [6], глава 41; [7], глава 4). Кроме того, ядру кислорода передается, в среднем, в 4,5 раз меньшая энергия, чем ядру водорода, а количество ядер водорода, в расчете на один атом кислорода, составляет для различных биообъектов $1\div 2$. Поэтому ядрам водорода передается в ~ 30 раз большая энергия, чем ядрам кислорода.

Дальнейшая судьба энергии, передаваемой частицам мишени, зависит от релаксационных процессов в треках ядер отдачи.

Пространственно-временные характеристики области локализации энергии ядра отдачи

Выделение энергии при торможении иона (ядра отдачи) в веществе мишени можно представить в виде суперпозиции линейных ионизационных потерь энергии вдоль траекторий первичного и вторичных ионов, и локальных потерь энергии за счет соударения первичного и вторичных ионов с атомами вещества [9]. Область локализации каждой такой порции энергии находится вблизи

¹ Здесь не показано различие между вторичными ионами ^1H и ^{16}O , дабы не загромождать деталями черно-белый рисунок.

взаимодействия иона с веществом, будем иметь в виду средние размеры.

Энергия, сообщаемая веществу через атомы отдачи (вторичные, третичные и т.д. ионы), не является малой, по сравнению с энергией, передаваемой ионной подсистеме непосредственно от первичного иона. Поэтому характерные размеры области взаимодействия определяются не только траекторией первичного иона, но и вторичными частицами. За основной пространственный масштаб, в первом приближении, может быть принята средняя проекция пробега иона на направление начальной скорости. В качестве аналитической аппроксимации энергетической зависимости среднего проективного пробега ядра ^{16}O будем использовать функцию

$$l_o(E) = 1,05E^{0,6} + 0,8, \quad (10 \text{ эВ} < E < 1000 \text{ эВ}), \quad (5)$$

где энергия иона задается в электронвольтах, а длина пробега – в ангстремах. Ошибка в определении длины пробега в этом случае $\sim 1 \text{ \AA}$. Для пробега низкоэнергетического иона ^{40}Ca пригодна аппроксимация

$$l_{Ca}(E) = 1,1E^{0,565} + 2, \quad (10 \text{ эВ} < E < 1000 \text{ эВ}). \quad (6)$$

Формулы (5), (6) являются результатом обработки данных, полученных с помощью программы TRIM2000 для жидкой воды в качестве мишени.

В таблице 2 приведены средние пробеги других элементов, наиболее распространенных в веществе биообъектов. В качестве среды выбиралась вода, как вещество, родственное по элементному составу и физико-химическим свойствам многим биообъектам.

Таблица 2. Средние проекции пробегов (в ангстремах) ионов различных энергий (в электронвольтах) в воде [9].

Элемент	Энергия, эВ								
	25	50	75	100	150	200	300	500	1000
H	13	22	31	40	57	73	107	176	351
C	8	11	14	17	21	25	32	45	74
N	8	11	14	16	20	24	31	42	69
Na	9	12	15	17	20	24	30	40	61
P	9	12	15	17	21	24	29	39	56

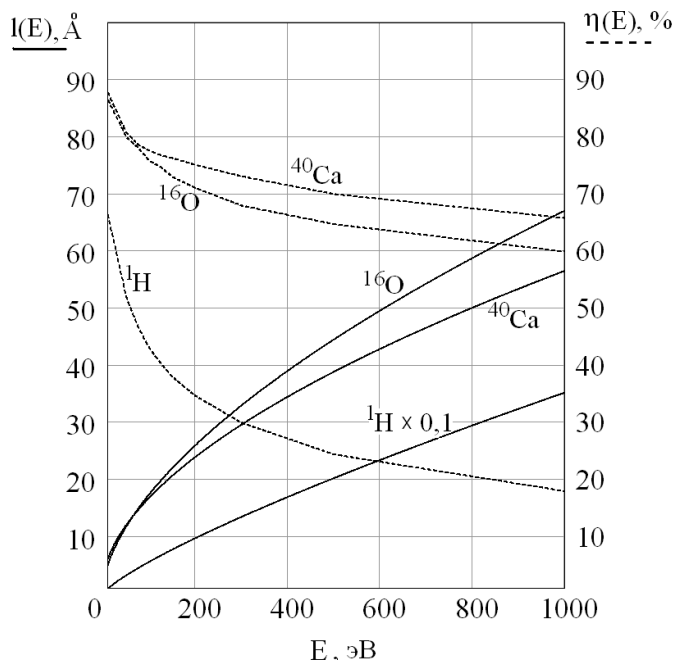


Рис. 3. Средние проективные пробеги $l(E)$ (сплошные кривые) и доли энергии $\eta(E)$, передаваемой ионной подсистеме (пунктирные кривые), для ядер отдачи ^{16}O , ^{40}Ca и ^1H .

зависимости среднего проективного пробега $l(E)$ и доли энергии $\eta(E)$, передаваемой ионной подсистеме ионами ^{16}O , ^{40}Ca и ^1H . Для иона водорода длина пробега показана уменьшенной в 10 раз. Данные по иону кислорода применимы, с точностью $\sim (10 \div 15)\%$ и к другим тяжелым ионам, представленным в таблице 2.

Время возникновения области взаимодействия ядра отдачи с веществом τ_1 (т.е. длительность первой столкновительной фазы релаксации энергии ядра отдачи) можно оценить с помощью приближенной формулы

Поперечные размеры области термализации энергии ядра отдачи определяются каскадами вторичных частиц и длиной релаксации R_0 энергии в температуру. Средние размеры каскадов вторичных частиц оценивались на основе анализа картины атомных столкновений большого числа ионов с заданной энергией. Установлено, что средние поперечный и продольный размеры каскада, порождаемого ядром отдачи тяжелее ^{12}C с энергией $25 \text{ эВ} < E < 300 \text{ эВ}$ близки друг к другу (см. примеры каскадов от ядер отдачи $^{16}\text{O}^+$ на рис. 2). Для больших энергий средний продольный размер каскада столкновений начинает превышать поперечный (область аппроксимируется эллипсоидом). Однако мы пользуемся сферической моделью ТУП для всех тяжелых ядер отдачи вплоть до энергий $\sim 1 \text{ кэВ}$, поскольку она дает правильный порядок величин и качественно правильную картину процессов.

Доля энергии, передаваемая в ходе атомных столкновений непосредственно ионной подсистеме, является определяющей для всех ядер отдачи (кроме водорода), возникающих при рассеянии нейтронов из выбранного диапазона энергий. Эта доля зависит от энергии ядра отдачи.

На рис. 3 представлены энергетические

$\tau_1 \approx l(E)\sqrt{2m_n A/E}$, где A – атомный вес ядра отдачи. Для иона $^{16}\text{O}^+$ с энергией $E = 100$ эВ получаем $\tau_1 \approx 2 \cdot 10^{-14}$ с.

Температура в пике ядра отдачи

Дальнейшая трансформация энергетических потерь ядра отдачи проходит по-разному для потерь на возбуждение ионной и электронной подсистем вещества мишени. Первые содержатся в сравнительно небольшом количестве $N_{ex}(E)$ возбужденных атомов, энергия которых за время ион - ионной релаксации τ переходит в тепловую энергию небольших сферических областей вещества, окружающих возбужденные атомы. Радиус каждой из таких областей можно оценить с помощью выражения, известного из теории теплопроводности [5,10]: $R_0 = 2\sqrt{\kappa\tau}$. Ориентируясь на теплофизические характеристика воды, как основной составляющей большинства биообъектов, примем коэффициент температуропроводности $\kappa \approx 1,34 \cdot 10^{-3}$ см²/с. Время ион - ионной релаксации τ в твердых телах определяется предельной частотой в спектре фононных колебаний твердого тела, т.е. частотой, соответствующей температуре Дебая θ_D (см. [11], глава 6). Так, принимая $\theta_D = 500$ К, получаем $\tau = 2\pi\hbar/k_B\theta_D \approx 10^{-13}$ с., где k_B – постоянная Больцмана. В случае жидкой мишени, за τ может быть принято время между последовательными соударениями молекулы при тепловом движении:

$$\tau = \left(\frac{Am}{\rho} \right)^{\frac{1}{3}} \sqrt{\frac{Am}{3k_B T_0}}, \quad (7)$$

где T_0 – температура среды в районе атомного каскада. Принимая $\rho = 1$ г/см³, $T_0 = 700$ К, $A=18$ (вода), получаем $\tau \approx 3 \cdot 10^{-13}$ с. С учетом проведенных оценок, получаем для радиуса сферической области, на которую распределяется энергия возбужденного атома за время ион - ионной релаксации $R_0 \approx 4$ Å. Приближенное условие, что области релаксировавшей в температуру энергии возбужденных атомов перекрываются, образуя единое температурное поле, имеет вид $N_{ex}(E) \geq [L(E)/2R_0 + 1]^3$. Анализ результатов компьютерного моделирования показывает, что приведенное условие выполняется для энергий ионов ^{16}O и ^{40}Ca $E \leq 300$ эВ. В качестве примера, на рис. 2 приведена область термализации вокруг трека ядра отдачи ^{16}O с начальной энергией $E = 200$ эВ. Граница области термализации определяется как огибающая поверхность вокруг семейства сфер радиусом $R_0 = 4$ Å с центрами в точках столкновений первичного и вторичных ионов с атомами среды. В дальнейшем будем понимать под термоупругим пиком (ТУП) именно область, в которой термализовалась энергия иона (ядра отдачи) [5]. Для энергий ионов $E < 300$ эВ все три пространственных измерения области взаимодействия примерно равны друг другу, поэтому обоснованным представляется использование сферически – симметричного приближения для описания тепловых и механических эффектов вблизи ТУП. С учетом примерного равенства всех трех пространственных измерений области энерговыделения для тяжелых ядер отдачи, можно принять, что часть энергии иона $\eta(E)E$, переданная ионной подсистеме, к моменту окончания термализации содержится в сферической области вещества радиусом

$$R_1(E) = R_0 + \frac{l(E)}{2}. \quad (8)$$

Значительная часть энергии иона переходит возбужденным электронам, причем эта часть увеличивается с ростом энергии иона. Релаксация энергии возбужденных электронов в температуру электронной подсистемы происходит за время электрон - электронной релаксации $\tau_{ee} \approx 10^{-16}$ с. После установления электронной температуры остывание перегретого электронного газа происходит одновременно за счет двух процессов. Первый – диффузия электронов, приводящая к расплыванию перегретой области по закону $R_e(t) = 2\sqrt{\kappa_e(t + \tau_{ee})}$, где κ_e – коэффициент электронной температуропроводности. Используя выражение $\kappa_e = l_e v_F / 3$, где l_e – средняя длина свободного пробега электрона со скоростью Ферми $v_F \approx 10^8$ см/с (при высоких температурах $l_e \sim 1$ нм), получаем, по порядку величины $\kappa_e \geq 1$ см²/с. Второй процесс – теплопередача между электронной и ионной подсистемами, характеризующаяся временем электрон – ионной релаксации $\tau_{ei} \sim \tau_{ee} M / m_e \sim 10^{-12}$ с, существенно превышающим два других характерных времени τ_{ee} и τ [12]. К моменту выравнивания электронной и ионной температур радиус области термализации перегретого электронного газа $R_e = 2\sqrt{\kappa_e(\tau_{ei} + \tau_{ee})}$ превышает 10^{-6} см, а перегревная температура в ней (за счет ионизационных потерь) $\Delta T_e = \frac{3E(1 - \eta(E))}{4\pi\rho C R_e^3} \leq 0,1$ К. В противоположность этому, квазисферический пик иона, содержащий после ион - ионной релаксации энергию $\eta(E)E$, имеет существенно меньший размер $2R_1(E) \sim (10 \div 70)$ нм. Максимальная перегревная температура в термоупругом пике задается выражением

$$T(E) = \frac{3\eta(E)E}{4\pi\rho C [R_1(E)]^3}, \quad (9)$$

и для ТУП ионов ^{16}O и ^{40}Ca лежит в диапазоне 100÷400 К (см. рис. 4). Время существования перегретой области («время жизни» ТУП) τ_{life} определяется скоростью процесса теплопередачи и задается выражением

$$\tau_{\text{life}}(E) = \frac{[R_1(E)]^2}{4\kappa}. \quad (10)$$

Для ТУП ионов кислорода с энергией от 25 эВ до 1000 эВ время жизни τ_{life} изменяется от 3 пс до 30 пс, практически, по линейному закону. Таким образом, между характерными временами процессов, ответственных за возникновение термоупругого пика, выполняются соотношения:

$$\tau_1 \ll \tau \ll \tau_{\text{life}}, \quad (11)$$

означающие, что каждый из этих процессов может рассматриваться независимо от остальных. В частности, можно полагать, что нагрев ТУП происходит практически мгновенно, по сравнению с процессом его остывания.

Не боясь повториться [5,10], задержимся на принципиально важном вопросе применимости термодинамического описания к столь малым частицам вещества. Как известно (см. [11], глава 12), относительная среднеквадратичная флуктуация температуры T некоторого постоянного объема вещества V , содержащего N атомов, задается выражением $\sqrt{\Delta T^2}/T = \sqrt{k_B/(C_V Am_n N(E))}$, где $N(E) = 4\pi R_1^3(E)\rho/(3Am_n)$, C_V – удельная теплоемкость вещества при постоянном объеме, k_B – постоянная Больцмана. Используя реальное значение удельной теплоемкости воды $C_V = 4,2$ Дж/г/К, получаем $\sqrt{\Delta T^2}/T \approx \sqrt{1/10N}$. Так, для ТУП иона ^{16}O с энергией $E = 25$ эВ имеем $N \approx 60$, и $\sqrt{\Delta T^2}/T \approx 0,04$; для ТУП иона ^{16}O с энергией $E = 500$ эВ имеем $N \approx 2000$, и $\sqrt{\Delta T^2}/T \approx 0,007$. Таким образом, температура, как термодинамическая характеристика, может использоваться для описания состояния вещества в ТУП, в рамках оцененной точности. В дальнейшем мы будем широко использовать термодинамическое описание состояния вещества и гидродинамический подход при изучении ТУП ядер отдачи, являющихся, по существу макроскопическими объектами нанометровых размеров. Разумеется, главным критерием жизнеспособности предлагаемой модели является соответствие ее предсказаний результатам экспериментов.

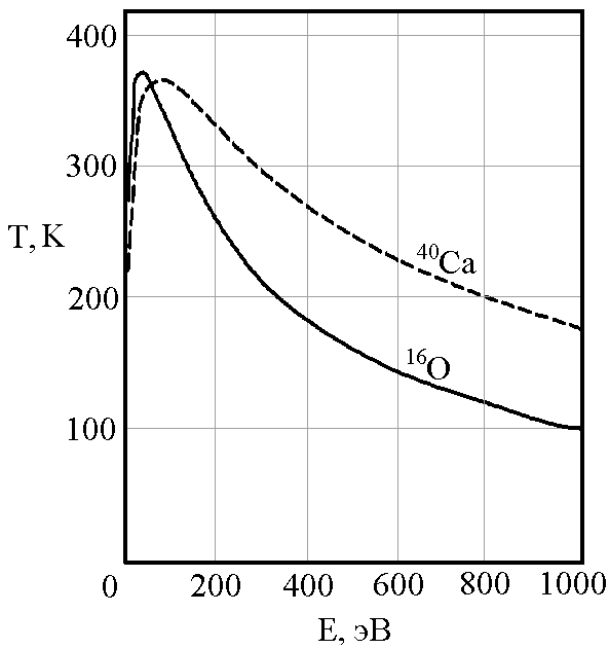


Рис. 4. Зависимость от энергии ядра отдачи перегретой температуры в термоупругих пиках ядер отдачи ^{16}O и ^{40}Ca в воде.

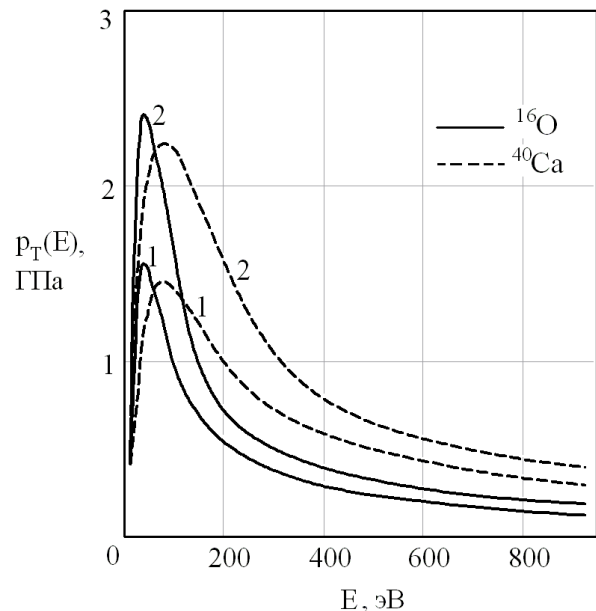


Рис. 5. Зависимость от энергии ядра отдачи термоупругого давления в пиках ядер отдачи ^{16}O (сплошные кривые) и ^{40}Ca (пунктирные кривые) при различных температурах мишени (вода): $T_0 = 0^\circ\text{C}$ и $T_0 = 40^\circ\text{C}$ (кривые 1 и 2, соответственно).

В случае ядра отдачи ^1H с энергией ~ 1000 эВ область релаксации энергии в температуру имеет древовидную структуру, состоящую из ветвящихся квазицилиндрических областей, образующихся вокруг траекторий первичного и вторичных ионов и имеющих поперечник $2R_0 \approx 10$ Å при характерной длине $l_H > 350$ Å

(см. рис. 2). Для оценки сверху температуры в таком «термоупругом пике» используем выражение

$$T_H \leq \frac{E\eta_H(E)}{\pi\rho CR_0^2 l_H(E)}. \quad (12)$$

Принимая $E = 1$ кэВ, $\eta_H = 0,18$, $l_H = 350 \text{ \AA}$, получаем $T_H < 300$ К. Очевидно, что полученная оценка сильно завышена. Реальная длина, вдоль которой распределены потери энергии иона, значительно превышает пробег иона, так как необходимо учитывать потери энергии вдоль траекторий вторичных ионов. Кроме того, проективный пробег меньше полного пробега примерно, в $1,5 \div 2$ раза. С учетом этого, перегревная температура в термоупругом пике иона водорода не превышает 100 К. Ионизационные потери иона не могут существенно повысить эту величину, так как они распределены в более широкой области с радиусом $R_c \gg R_0$.

Термоупругое давление в пике ядра отдачи

Быстрый нагрев вещества ТУП приводит к возникновению термоупругого давления $p_T(E)$. При выполнении условия

$$\tau \ll 2R_1(E)/s \ll \tau_{\text{life}}(E), \quad (13)$$

где s – скорость звука, величина давления в пике определяется соотношением [4,10]:

$$p_T(E) = \rho C \int_{T_0}^{T_0+T(E)} \Gamma(x) dx, \quad (14)$$

где T_0 – начальная температура мишени, $\Gamma(T)$ – параметр Грюнрайзена вещества мишени, в общем случае зависящий от температуры. Отметим, что условие (13) выполняется практически для всех ТУП, создаваемых ядрами отдачи в биообъектах при $E > 25$ эВ.

С использованием зависимости $\Gamma(T)$ для водоподобного объекта, приведенной в [10], были рассчитаны термоупругие давления в ТУП, порождаемых ядрами отдачи при упругом рассеянии нейтронов в веществе мишени. На рис. 5 приведены амплитудные величины давлений, возникающих в пиках ядер отдачи ^{16}O и ^{40}Ca , в зависимости от энергии ядер и при двух различных температурах вещества мишени. Как видно из рисунка, термоупругие давления в пиках варьируют в довольно широких пределах от 2,5 ГПа при малых энергиях ионов $E \leq 100$ эВ до 0,1 ГПа при $E \sim 1$ кэВ. Максимальной величины давление достигает в пиках ионов с энергией 40эВ (ион ^{16}O) и 80эВ (ион ^{40}Ca). Температурная зависимость параметра Грюнрайзена приводит к существенному различию величин давлений в пиках ядер отдачи при различных начальных температурах вещества мишени. Термоупругое давление p_T , возникающее в ТУП за времена $\tau \ll t_s = 2R_1/s$, воспринимается материалом мишени как своеобразный термоудар и служит причиной для возбуждения сферической волны акустических напряжений, расходящейся из ТУП и реализующей механическое воздействие на материал на значительных удалениях от ТУП. Время действия термоупругих напряжений в объеме ТУП в случае (квази)жидкого материала биообъекта определяется временем ухода акустической волны $t_s = 2R_1(E)/s$. Если материал биообъекта является твердым телом, то есть обладает сдвиговой жесткостью, то значительная часть термоупругих напряжений сохраняется в пике в течение характерного времени $\tau_{\text{life}}(E)$, уменьшаясь пропорционально температуре, по мере остывания вещества пика [5,14].

Импактный механизм генерации давления вблизи пика ядра отдачи

Помимо термоупругости, еще одной причиной механического действия излучения на вещество является передача импульса от рассеиваемого нейтрона ядру отдачи и от последнего – веществу мишени в объеме ТУП. Время релаксации импульса, по-видимому, совпадает с временем термализации энергетических потерь ядра отдачи $\tau \approx 3 \cdot 10^{-13}$ с. Такая динамическая нагрузка может рассматриваться как «мгновенное» сообщение малому количеству вещества в объеме термоупругого пика конечной скорости

$$v(E) = \frac{3 \sqrt{2m_n A E \eta(E)}}{4\pi\rho [R_1(E)]^3}. \quad (15)$$

Для ядра отдачи ^{16}O с энергией $E = 100$ эВ получаем $v \approx 10^4$ см/с. В приближении безграничной жидкой мишени, где могут распространяться только звуковые волны, связанные с изменением объема, динамическая нагрузка не приводит к возбуждению акустического импульса. Она, однако, является причиной возникновения кратковременного импульса давления вокруг ТУП, движущегося в вязкой среде. Используя формулу Стокса (см. [13], глава 2) для оценки величины силы сопротивления среды, получаем следующее уравнение движения для сферы с начальной скоростью $v(E)$:

$$x(t, E) = \frac{2\rho R_1^2(E)}{9\mu} v(E) \left[1 - \exp\left\{ -\frac{9\mu t}{2\rho R_1^2(E)} \right\} \right], \quad (16)$$

где μ – вязкость вещества мишени. Отметим, что рассматриваемое движение квазисферического ТУП происходит при малых числах Рейнольдса

$$\text{Re}(E) = \frac{\rho v(E) R_1(E)}{\mu} \sim 0,1, \quad (17)$$

что обосновывает применимость формулы Стокса. Оценка числа Рейнольдса получена с использованием параметров ТУП ионов ^{16}O и ^{40}Ca с энергией из рассматриваемого диапазона и для $\mu = 0,0082$ дин·с/см² (мишень - вода при комнатной температуре).

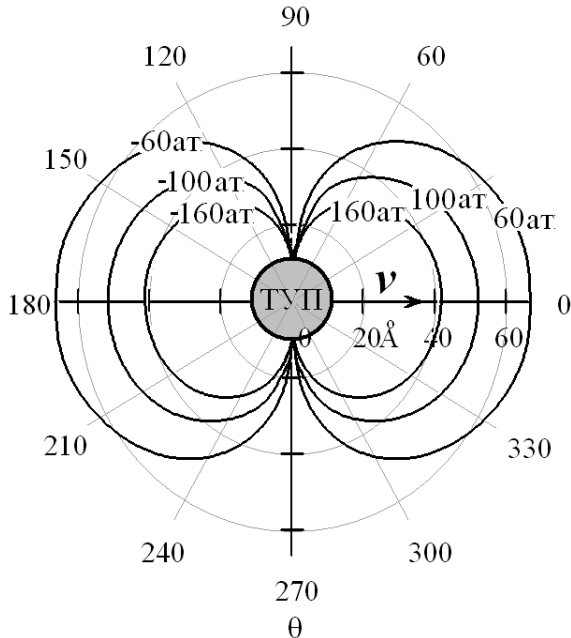


Рис. 6. Изобары давления в жидкой мишени вокруг ТУП ядра отдачи ^{40}Ca с энергией 50 эВ, движущегося со скоростью $v = 2,1 \cdot 10^4$ см/с

динамический» [2,4] механизм генерации объемных сил приводит к возникновению области положительных давлений (сжатие вещества) перед движущимся пиком и симметричной области отрицательных давлений (разряжение вещества) за ним.

ОБСУЖДЕНИЕ, ВЫВОДЫ И ПЕРСПЕКТИВЫ

Подведем итоги анализа механических эффектов, возникающих при передаче энергии от нейтрона с энергией $E_n = (0,5 \div 5)$ кэВ веществу биогенного материала, в элементном составе которого преобладают атомы легких элементов ^1H , ^{12}C , ^{14}N , ^{16}O , ^{40}Ca и т.д. Взаимодействие нейтронов выбранного диапазона энергий с ядрами элементов имеет характер упругого рассеяния. Так, в результате рассеяния нейтронов с энергией $E_n = 2$ кэВ образуются ионы ^1H , ^{16}O и ^{40}Ca со средними энергиями 1000, 200 и 100 эВ, соответственно. В сумме, ядрам тяжелее углерода передается от двух (вода, кровь) до десяти (кость) процентов общей переданной энергии.

Ядра отдачи, по длине их пробега и по пространственным характеристикам области релаксации энергии в температуру, можно разбить на два класса. К первому относятся ядра ^1H , с энергией ~ 1 кэВ, имеющие пробеги $l_H \geq 350$ Å, значительно превышающие характерную длину релаксации $R_0 \approx 4$ Å энергии в температуру. Область термализации энергии иона водорода имеет древовидную структуру, состоящую из неперекрывающихся «ствола» и «ветвей» с толщинами $2R_0$. Перегревная температура в таком древовидном «пике» относительно невелика (< 100 К), что связано со сравнительно большой общей длиной пробега первичного и вторичных ионов (≥ 1000 Å) и преобладанием потерь на возбуждение электронов ($\geq 80\%$).

Ко второму классу относятся ядра отдачи тяжелее ^{12}C с энергией 100 ÷ 200 эВ, имеющие сходные средние размеры областей энерговыделения (при одинаковой энергии ядер). Для определенности, будем говорить о пике ядра ^{16}O . После первой стадии передачи энергии в процессе рассеяния иона на электронах и атомах вещества, длящейся время $\tau_1 \sim 10^{-14}$ с, потерянная энергия иона оказывается распределенной между возбужденными электронами ($\sim 20\%$ от общей энергии иона) и небольшим количеством возбужденных атомов ($\sim 80\%$). Перегрев вещества за счет ионизационных потерь пренебрежимо мал ($\sim 0,1$ К), ввиду большой подвижности электронного газа и больших времен электрон-ионной релаксации $\tau_{ei} \geq 10^{-12}$ с. В противоположность этому, энергия возбужденных ионов преобразуется в температуру за более короткое время ион-ионной релаксации $\tau \approx (1 \div 3) \cdot 10^{-13}$ с. Энергия распределяется в области, которую можно аппроксимировать

Из (16) следует, что характерное время движения ТУП вследствие ударной нагрузки, обусловленной быстрой передачей импульса от ядра отдачи, равно

$$\tau_{dyn}(E) = \frac{2\rho R_1^2(E)}{9\mu} \approx 1 \text{ пс}, \quad (18)$$

а полный путь, проходимый пиком

$$X(E) = \frac{2\rho R_1^2(E)}{9\mu} v(E) \approx 1 \text{ Å}. \quad (19)$$

Дополнительное давление вокруг движущегося в вязкой жидкости шара радиусом $R_1(E)$ оценим с помощью формулы, выведенной для случая равномерного движения шара со скоростью $\vec{v}(E)$ (см. [13], глава 2):

$$p_{dyn}(E, \vec{r}) = \frac{3}{2} \mu \frac{\vec{n} \cdot \vec{v}(E)}{r^2} R_1(E), \quad (20)$$

где $\vec{n} = \vec{r}/r$. Вблизи границы ($r = R_1(E)$) пика иона ^{40}Ca с энергией 50 эВ и по ходу его движения избыточное «импактное» давление равно $p_{dyn} \approx 0,25$ ГПа, то есть оно достигает $\sim 20\%$ от величины термоупругого давления.

На рис. 6 показаны изобары в окрестностях термоупругого пика иона ^{40}Ca с энергией 50 эВ, приобретшего скорость $v = 2,1 \cdot 10^4$ см/с за счет поглощения импульса иона. Обратим внимание на то, что рассмотренный «импактный» или «собственно

сферой с радиусом $R_1(E) \sim (10 \div 30) \text{ \AA}$, перегретой до температуры $300 \div 400 \text{ K}$ (в диапазоне энергий иона от 25 эВ до 200 эВ). Термоупругий пик является макроскопическим объектом, содержащим довольно большое число атомов, достаточное, чтобы можно было ввести термодинамические переменные – температуру, давление и объем – для его описания. Стадия установления температурного поля в пике длится время $\tau \geq \tau_1$, что обосновывает возможность ее независимого рассмотрения.

Таким образом, температурное поле, возникающее в материале при облучении его нейтронами малых и умеренных энергий состоит из совокупности «микроожогов» различных размеров, формы и с различной перегретой температурой. При этом, содержащие основную часть поглощенной энергии излучения «микроожоги» от ядер отдачи ^1H , являются гораздо более холодными, по сравнению с «микроожогами» от более тяжелых ядер отдачи. Именно последние являются поставщиками мощных импульсов давления, способных необратимо изменять структуру живой материи.

Умеренность перегрева вещества ТУП исключает возможность проявления пузырькового механизма генерации звука [2]. Действительно, простые оценки показывают, что энергия ядра отдачи не достаточна для испарения в пределах ТУП вещества с параметрами, близкими к параметрам воды. Это позволяет пользоваться уравнениями термоакустики для расчета величин возникающих акустических напряжений.

Импульсный нагрев вещества ТУП приводит к быстрому тепловому расширению и, как следствие, образованию переменных термоупругих напряжений $\sim 1 \text{ ГПа}$, способных повлиять на структуру биообъекта в пике и его окрестностях. Величина напряжений существенно зависит от исходной температуры T_0 материала мишени (см. рис. 5). Для выяснения зависимости амплитуды термоакустического импульса $p_T(E, \vec{r})$ от размера пика, величины и длительности энерговыделения, а также от упругих характеристик и температуры мишени, необходимо решить задачу о возбуждении термоакустического импульса сферически-симметричным полем тепловых источников в упругом пространстве. При этом необходимо учитывать имеющую место температурную зависимость коэффициента генерации упругих волн. В настоящей работе эта задача не рассматривается. Отметим только, что, ввиду сферической симметрии поля тепловых источников, амплитуда возникающей упругой волны зависит только от модуля радиус-вектора \vec{r} из центра ТУП в точку наблюдения. Изобары термоакустической волны представляют сферические поверхности $|\vec{r}| = \text{const}$. В случае жидкой мишени термоакустические напряжения в центре пика отличны от нуля лишь в течение времени акустической релаксации пика $\tau_s(E) = 2R_1(E)/s \sim (1 \div 4) \cdot 10^{-12} \text{ с}$. Если материал мишени является твердым телом (кость), то и после ухода акустической волны в окрестности ТУП сохраняются квазистатические напряжения [14]. В дальнейшем эти напряжения уменьшаются по мере остывания пика пропорционально его температуре [5].

Что касается акустического излучения от ТУП ионов водорода, то древовидность его структуры не позволяет рассчитывать порождаемые ими термоакустические импульсы в приближении сферического пика. В настоящей работе мы ограничимся только оценками термоупругих напряжений внутри пиков. Согласно этим оценкам, термоакустические напряжения в ТУП ионов водорода, по крайней мере, в 10 раз меньше, чем в пиках ионов ^{16}O и других тяжелых ионов. С учетом поглощения и геометрического фактора, представляется маловероятным, что соответствующие импульсы давления могут вызывать необратимые изменения в структуре живой материи за пределами порождающих их пиков.

Передача импульса от ядра отдачи к веществу в объеме пика также приводит к возникновению объемных сил в окрестностях ТУП. Такая динамическая нагрузка может рассматриваться как «мгновенное» сообщение малому количеству вещества в объеме ТУП конечной скорости $v \approx 10^4 \text{ см/с}$ (толчок). В жидкой мишени импактный механизм не приводит к возбуждению акустического импульса, но порождает кратковременное поле давлений вокруг ТУП, движение которого тормозится вязкой средой. Избыточное давление действует время $\tau_{\text{dyn}} \sim 10^{-12} \text{ с}$ и достигает величины $p_{\text{dyn}} \approx 0,25 \text{ ГПа}$, сравнимой с вкладом термоупругости. Роль такого механизма возрастает для процессов с участием низкоэнергетических тяжелых ионов (например, ионов ^{40}Ca , ^{56}Fe и т.д.) в плотных мишенях, поскольку для его проявления важны как малость энергии, так и большая масса ионов, порождающих ТУП. Напротив, для легких ядер отдачи ^1H , вклад импактного механизма в генерацию механических напряжений мал, по сравнению с термоупругим механизмом.

Если биоструктура мишени разрушается при импульсных давлениях $p > p_D$, то поверхность изобары $p_T(E, \vec{r}) + p_{\text{dyn}}(E, \vec{r}) = p_D$ может быть принята за границу области биологического действия, ОБД, внутри которой имеют место необратимые изменения [10]. Ввиду асимметрии поля давлений p_{dyn} , ОБД также не обладает сферической симметрией. Для определения точного уравнения поверхности ОБД необходимо знание функции $p_T(E, \vec{r})$. Предварительные оценки показывают, что характерный размер ОБД вблизи точек рассеяния нейтронов на ядрах отдачи тяжелее ^{12}C в биогенном материале имеет порядок $\sim 100 \div 200 \text{ \AA}$, что сравнимо с характерными размерами субклеточных структур биообъектов, в частности, структур, ответственных за наследственность. Более всего термомеханическое действие нейтронного излучения должно проявляться в структурах, насыщенных тяжелыми элементами.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Аскарьян Г.А. Гидродинамическое излучение от треков ионизирующих частиц в стабильных жидкостях. //Атомная энергия.- 1957.- Т.3.- № 8.- С.152-153.
2. Залюбовский И.И., Калиниченко А.И., Лазурик В.Т. Введение в радиационную акустику. Изд-во при Харьковском государственном университете издательского объединения «Вища Школа». Харьков, 1986.- 167 с.
3. Лямшев Л.М. Радиационная акустика. М.: «Наука», Физматлит, 1996.- 304 с.
4. Kalinichenko A.I., Lazurik V.T., Zalyubovsky I.I. Introduction to Radiation Acoustics. In series: The Physics and Technology of Particle and Photon Beams.- V.9 // Harwood Academic Publishers.- 2001.- 239 p.
5. Калиниченко А.И., Стрельницкий В.Е. Роль термоупругих напряжений в формировании алмазоподобного покрытия при облучении аморфного углерода низкоэнергетическими ионами C^+ . // Физика и химия обработки материалов.- 2003, №2. - С.5-10.
6. Физические величины. Справочник. М.: Энергоатомиздат, 1991.- 1232 с.
7. Власов Н.А. Нейтроны. М.: «Наука», 1971.- 551 с.
8. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Механика. М.: «Наука», 1965.- 203 с.
9. Ziegler J. F., Biersack J. P. and Littmark U. The Stopping and Range of Ions in Solids. // Pergamon Press. New York. 1996.
10. Kalinichenko A.I., Lazurik V.T., Tovstiyak V.V. Thermoacoustic impact of ionizing radiation on biological structures. Вісник Харківського університету № 525, Біофізичний вісник. 2001, вип.1(8), С.93-100.
11. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Статистическая физика. М.: «Наука», 1976.- 583 с.
12. Каганов И.И., Лифшиц И.М., Танатаров Л.В. Релаксация между электронами и решеткой //ЖЭТФ.- 1956. - Т.37. - Вып.2(8). - С.232-237.
13. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Гидродинамика. М.: «Наука», 1986.- 736 с.
14. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теория упругости. М.: «Наука», 1965.- 203 с.

THERMOMECHANICAL ACTION OF SLOW NEUTRONS ON BIOGENIC MATERIALS

A.I. Kalinichenko, V.V. Tovstiyak

*Kharkiv National University, 4 Svobody sq., 61077 Kharkiv, Ukraine**E-mail: kalinichenko@univer.kharkov.ua*

Formation of small overheated regions – thermoelastic peaks (TEPs) - near to points of scattering of neutrons with energy from 0.5 to 5 keV in biogenic materials, due to energy loss of recoils is theoretically investigated. On basis of computer simulation of process of the energy transfer from the recoil to atoms of the material and the relaxation processes account, the origin time and the lifetime, the size and the shape of TEPs formed by different recoils are determined. The possibility of thermodynamic description of the matter state in TEP is considered. Overheat temperature and thermoelastic pressure in TEP are determined. Classification of TEPs by geometrical characteristics, overheat and overpressure in them is carried out. An impact mechanism of pulsed pressure generation caused by recoil momentum transfer to TEP material is investigated. Characteristics of a zone of biological action around TEP where the material undergoes irreversible changes are considered.

KEYWORDS: neutron, elastic scattering, recoil, ion range, thermoelastic peak, destruction