Тепловое действие рентгеновского излучения на совершенные кристаллы. Постановка задачи и аналитическое решение

А. П. Орешко[a]
Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова, физический факультет, кафедра физики твердого тела. Россия, 119991, Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 2.

Поступила в редакцию 27.01.2020, после доработки 20.02.2020, принята к публикации 03.03.2020.

Найдены аналитические выражения, в наиболее общем виде описывающие пространственное и временное распределения теплового поля в анизотропном кристалле, находящемся в условиях теплового обмена с окружающей средой под действием синхротронного рентгеновского излучения или импульсов рентгеновского лазера на свободных электронах с произвольной пространственно-временной структурой.

Ключевые слова: тепловое действие рентгеновского лазера на свободных электронах, тепловое действие рентгеновского излучения, теплопроводность, анизотропные среды.
УДК: 51-72, 536.21, 536.331. PACS: 02.30.Jr, 44.05.+e, 44.40.+a.

ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время для исследования структуры различных систем все большее применение находят мощные источники рентгеновского излучения: специализированные источники синхротронного излучения 3-го поколения и рентгеновские лазеры на свободных электронах. Высокая яркость этих источников приводит к значительному росту тепловой нагрузки как на элементы формирующей рентгеновской оптики, так и на сами изучаемые объекты.

Несмотря на относительно малую интенсивность излучения рентгеновских трубок, уже к 1940-м гг. была разработана экспериментальная методика определения нагрева объектов рентгеновским излучением (например, [1, с. 408]). Однако в классических трудах — «библиях» по физике рентгеновских лучей и рентгеновскому структурному анализу [2–7] — тепловое действие рентгеновского излучения (РИ) не рассматривается.

Первая известная автору настоящей статьи работа, посвященная тепловому действию РИ, относится к 2008 г. [8]. В [8] на основе численного решения уравнения теплопроводности вычисляется профиль теплового поля в кристалле кремния $30\times10\times2$ мм, находящегося при температуре 293 K и облучаемого рентгеновским синхротронным излучением с энергией 10 кэВ и плотностью энергии 0.23 Вт/мм^2. Показано, что поверхность кристалла нагревается до максимальной температуры около 296 K.

Следующий шаг сделан в работах [9, 10], где на основе аналитического решения уравнения теплопроводности с граничными условиями 1-го рода проведен анализ пространственного и временного распределений температуры в кристалле под действием импульсов рентгеновского лазера на свободных электронах. Тепловые свойства модельного кристалла алмаза при этом описывались не тензором, а коэффициентом теплопроводности, т. е. кристалл обладал изотропными тепловыми свойствами. Такой подход оправдан для оценки теплового воздействия на элементы рентгеновской оптики, снабженные системой охлаждения, но неприменим в остальных случаях.

Так как кристаллы обладают существенно анизотропными тепловыми свойствами [11], то и описание их тепловых свойств одним скалярным коэффициентом теплопроводности является достаточно грубым упрощением.

К сожалению, автору настоящей статьи неизвестны иные работы, посвященные исследованию теплового действия РИ на кристаллы, обладающие анизотропными тепловыми свойствами. Вместе с этим, как было сказано выше и отдельно отмечалось в [9, 10], такая задача представляет значительный интерес в настоящее время.

1. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

При падении РИ на вещество часть излучения отражается от поверхности, часть рассеивается на атомах вещества, часть проходит сквозь вещество, а оставшаяся часть поглощается. Поглощение РИ описывается законом

$$I(x) = I_0 \exp(-\mu x), \tag{1}$$

где I_0 — интенсивность РИ на поверхности, $\mu = \tau + \sigma$ — линейный коэффициент ослабления, τ — коэффициент истинного поглощения, соответствующий исчезновению первоначального фотона РИ, σ — коэффициент рассеяния, соответствующий изменению направления первоначального фотона РИ, x — координата, отсчитываемая вглубь материала.

Исчезновение фотона РИ в процессе истинного поглощения происходит благодаря фотоэффекту, когда энергия фотона затрачивается на ионизацию атома. В результате истинного поглощения энергия излучения преобразуется в энергию фото- и оже-электронов и энергию вторичного излучения. Электроны, возникающие в облучаемом веществе, при взаимодействии с атомами этого вещества отдают им свою энергию, которая превращается в другие виды энергии (в зависимости от свойств поглощающего тела — тепловую, химическую энергию, энергию излучения, ионизации).

Следуя (1), в слое вещества толщиной x поглощается энергия

$$W(x) = W_0\{1 - [1 - R]\exp(-\mu x)\},$$

[a] E-mail: ap.oreshko@physics.msu.ru

где R — коэффициент отражения РИ: зеркального — при скользящих углах падения излучения на поверхность кристалла (в области полного внешнего отражения) вдали от условий дифракции, дифракционного — при больших углах падения излучения на поверхность в условиях дифракции и зеркально-дифракционного — при одновременном выполнении для падающего РИ условий дифракции для атомно-кристаллических плоскостей и зеркального отражения для поверхности. В наиболее общем случае коэффициент отражения будет функцией двух пространственных координат y, z, а также времени t: $R(y, z, t)$ [12–14]. Линейный коэффициент ослабления можно представить в виде [1, 6]

$$\mu = (\tau_e + \tau_S) + (\sigma_e + \sigma_S),$$

где коэффициент τ_e учитывает энергию, преобразованную в энергию фотоэлектронов, τ_S — энергию возникающего при ионизации атомов вещества характеристического РИ, σ_e — учитывает энергию, преобразованную в кинетическую энергию электронов отдачи, а σ_S — энергию рассеянного РИ.

Таким образом, часть поглощенной энергии падающего РИ, преобразованной в энергию электронов, характеризуется линейным коэффициентом электронного преобразования $\gamma = \tau_e + \sigma_e$ [1].

В отсутствие химических и ионизационных процессов в веществе, а также фазовых переходов вся энергия электронов $W_0\{1 - [1 - R]\exp(-\gamma x)\}$ идет на нагрев облучаемого вещества и передается теплопроводностью вглубь. Кинетика этого процесса описывается неоднородным уравнением теплопроводности с внутренним тепловым источником [15–19]:

$$c(\mathbf{r})\rho(\mathbf{r})[\partial T(\mathbf{r}, t)/\partial t] = \\ = \operatorname{div}[\Lambda(\mathbf{r}, t) \times \operatorname{grad} T(\mathbf{r}, t)] + F(\mathbf{r}, t), \quad (2)$$

где $c(\mathbf{r})$ — удельная теплоемкость, $\rho(\mathbf{r})$ — плотность, $T(\mathbf{r}, t)$ — температурное поле, $\Lambda(\mathbf{r}, t)$ – тензор теплопроводности, $F(\mathbf{r}, t)$ — плотность внутренних тепловых источников, $\mathbf{r}$ — пространственная координата, t — время. В рамках данной модели считается, что удельная теплоемкость и тензор теплопроводности не зависят от температуры. В реальной ситуации фактически это означает приближенное решение задачи лишь в пределах некоторого температурного интервала ΔT, в котором можно пренебречь изменением $c(T)$ и $\Lambda(T)$. При этом следует особо отметить, что само уравнение (2) получено в следующих приближениях [19]:

1. Деформация рассматриваемого объема, связанная с изменением температуры, является очень малой по сравнению с самим объемом.
2. Макроскопические частицы тела неподвижны относительно друг друга.

Более того, уравнение теплопроводности (2) является общей математической моделью для множества явлений теплопроводности и само по себе ничего не говорит о развитии процесса теплопереноса в рассматриваемом теле. Это объясняется неединственностью решения дифференциальных уравнений в частных производных. Для того, чтобы получить одно частное решение, соответствующее определенной задаче, необходимо иметь дополнительные данные, не содержащиеся в исходном уравнении. В эти данные входят:

1. Геометрические условия, задающие форму и размеры тела, в котором протекают процессы теплообмена;
2. Физические условия, задающие как тепло- и температуропроводность тела, так и плотность внутренних тепловых источников;
3. Граничные условия, задающие тепловое взаимодействие поверхности тела с окружающей средой;
4. Начальные условия, задающие распределение температуры в любой точке тела в некоторый начальный момент времени.

В качестве исследуемых объектов будем рассматривать идеальные диэлектрические или полупроводниковые кристаллы, где, следуя [20, 21], можно считать удельную теплоемкость и плотность не зависящими от координаты, а компоненты теплопроводности — не зависящими от координаты и времени.

Переходя к главным осям теплопроводности (x', y', z'), компоненты симметричного тензора 2-го ранга $\Lambda(\mathbf{r}, t)$ примут диагональный вид [13, 16, 19, 22]:

$$\Lambda'(\mathbf{r}') = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_2 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_3 \end{pmatrix},$$

а уравнение теплопроводности (2) с учетом всего вышесказанного упростится:

$$c\rho\frac{\partial T}{\partial t} = \lambda_1\frac{\partial^2 T}{\partial x'^2} + \lambda_2\frac{\partial^2 T}{\partial y'^2} + \lambda_3\frac{\partial^2 T}{\partial z'^2} + F.$$

В дальнейшем мы будем работать в системе главных осей теплопроводности и опустим знак «$'$» у координат, а сам исследуемый кристалл представим в виде прямоугольного параллелепипеда размером $l_1 \times l_2 \times l_3$ вдоль главных осей теплопроводности.

В большинстве рентгеновских экспериментов размер исследуемого образца небольшой, а время установки, юстировки и настройки аппаратуры велико. При этом если не проводятся температурные эксперименты, то образец находится в условиях конвективного и радиационного теплообмена с окружающей средой. Следовательно, распределение температуры исследуемого образца в начальный момент времени можно считать равномерным и равным постоянной и не зависящей от времени температуре окружающей среды:

$$T(\mathbf{r}, t) = T_0 = \text{const}.$$

В самом общем случае граничные условия поставленной задачи являются неоднородными граничными условиями третьего рода [16, 17, 22]:

$$\alpha(T_0 - T)|_S + \lambda_n\left.\frac{\partial T}{\partial n}\right|_S = \Psi(\mathbf{r}, t), \quad (3)$$

где $\mathbf{n}$ — единичная внешняя нормаль к поверхности (границе) S тела, α — коэффициент теплообмена,

$\Psi(\mathbf{r},t)$ — плотность энергии тепловых источников на поверхности. Так в [8] предполагается, что $\Psi(\mathbf{r},t) = \mu_a q_r - \sigma\mu_e T^4$, где μ_a и μ_e — поверхностные коэффициенты поглощения и испускания, q_r — поверхностная плотность падающего потока тепла, σ — постоянная Стефана—Больцмана, T — температура поверхности. Следуя [8, 17], пренебрежем изменением коэффициента теплообмена α от времени и его зависимостью от теплофизических свойств тела, т. е. на всех гранях образца будем считать $\alpha = \text{const}$.

Таким образом, поставленная нами задача сводится к решению третьей неоднородной краевой задачи для уравнения теплопроводности с источником в орторотропном параллелепипеде:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = a_1\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + a_2\frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + a_3\frac{\partial^2 T}{\partial z^2} + \frac{F(\mathbf{r},t)}{c\rho}, \quad \mathbf{r}\in V,\ t>0; \tag{4}$$

$$T(\mathbf{r},t=0) = T_0 = \text{const}, \quad \mathbf{r}\in V; \tag{5}$$

$$\alpha(T_0 - T)|_x + \lambda_1 \left.\frac{\partial T}{\partial x}\right|_x = \Psi_1(\mathbf{r},t), \quad x=0,\ 0<y<l_2,\ 0<z<l_3,\ t>0; \tag{6.1}$$

$$\alpha(T_0 - T)|_x + \lambda_1 \left.\frac{\partial T}{\partial x}\right|_x = \Psi_2(\mathbf{r},t), \quad x=l_1,\ 0<y<l_2,\ 0<z<l_3,\ t>0; \tag{6.2}$$

$$\alpha(T_0 - T)|_y + \lambda_2 \left.\frac{\partial T}{\partial y}\right|_y = \Psi_3(\mathbf{r},t), \quad y=0,\ 0<x<l_1,\ 0<z<l_3,\ t>0; \tag{6.3}$$

$$\alpha(T_0 - T)|_y + \lambda_2 \left.\frac{\partial T}{\partial y}\right|_y = \Psi_4(\mathbf{r},t), \quad y=l_2,\ 0<x<l_1,\ 0<z<l_3,\ t>0; \tag{6.4}$$

$$\alpha(T_0 - T)|_z + \lambda_3 \left.\frac{\partial T}{\partial z}\right|_z = \Psi_5(\mathbf{r},t), \quad z=0,\ 0<x<l_1,\ 0<y<l_2,\ t>0; \tag{6.5}$$

$$\alpha(T_0 - T)|_z + \lambda_3 \left.\frac{\partial T}{\partial z}\right|_z = \Psi_6(\mathbf{r},t), \quad z=l_3,\ 0<x<l_1,\ 0<y<l_2,\ t>0, \tag{6.6}$$

где $a_i = \lambda_i/(c\rho)$ – коэффициенты температуропроводности ($i = 1,2,3$), V — объем параллелепипеда. Попытка решения задачи (4)–(6) была предпринята в [22], однако в ходе решения граничные условия были заменены с граничных условий 3-го рода на граничные условия 2-го рода.

Пусть РИ распространяется вдоль оси x и падает на входную поверхность $x = 0$. Тогда плотность внутренних тепловых источников $F(\mathbf{r},t)$ можно представить в форме

$$F(\mathbf{r},t) = W_0(y,z,t)\{1 - [1 - R(y,z,t)]\exp(-\gamma x)\},$$

где $W_0(y,z,t)$ определяет временную зависимость интенсивности РИ на поверхности.

2. АНАЛИТИЧЕСКОЕ РЕШЕНИЕ ЗАДАЧИ

В силу линейности задачи (4) представим функцию $T(\mathbf{r},t)$ в виде суммы:

$$T(\mathbf{r},t) = v(\mathbf{r},t) + w(\mathbf{r},t),$$

подставим это выражение в (3), (4), (5) и выделим задачи для функций $w(\mathbf{r},t)$:

$$a_1\frac{\partial^2 w}{\partial x^2} + a_2\frac{\partial^2 w}{\partial y^2} + a_3\frac{\partial^2 w}{\partial z^2} = 0, \quad \mathbf{r}\in V,\ t>0; \tag{7.1}$$

$$\lambda_n \left.\frac{\partial w}{\partial n}\right|_S - \alpha w|_S = \Psi(\mathbf{r},t) - \alpha T_0,\ \mathbf{r}\in S,\ t>0, \tag{7.2}$$

и $v(\mathbf{r},t)$:

$$\frac{\partial v}{\partial t} = a_1\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + a_2\frac{\partial^2 v}{\partial y^2} + a_3\frac{\partial^2 v}{\partial z^2} + \frac{F(\mathbf{r},t)}{c\rho} - \frac{\partial w}{\partial t}, \quad \mathbf{r}\in V,\ t>0; \tag{8.1}$$

$$v(\mathbf{r},t=0) = T_0 - w(\mathbf{r},t=0), \quad \mathbf{r}\in V; \tag{8.2}$$

$$\lambda_n \left.\frac{\partial v}{\partial n}\right|_S - \alpha.v|_S = 0, \quad \mathbf{r}\in S,\ t>0. \tag{8.3}$$

Фактически это означает, что мы представили температурное поле внутри исследуемого образца $T(\mathbf{r},t)$ как суперпозицию «стационарного» (т. к. от времени зависят граничные условия) $w(\mathbf{r},t)$ и «нестационарного» с источниками $v(\mathbf{r},t)$ температурных полей.

Для решения задачи (7) представим искомую функцию в виде суммы $w(\mathbf{r},t) = w_1(\mathbf{r},t) + w_2(\mathbf{r},t) + w_3(\mathbf{r},t)$, каждое из слагаемых которой удовлетворяет исходному уравнению (7.1) и одномерным граничным условиям третьего рода. При этом для функции $w_1(\mathbf{r},t)$ однородные граничные условия третьего рода задаются на гранях $y = 0$, $y = l_2$, $z = 0$, $z = l_3$, для функции $w_2(\mathbf{r},t)$ — на гранях $x = 0$, $x = l_1$, $z = 0$, $z = l_3$, а для функции $w_3(\mathbf{r},t)$ — на гранях $x = 0$, $x = l_1$, $y = 0$, $y = l_2$:

$$a_1\frac{\partial^2 w_1}{\partial x^2} + a_2\frac{\partial^2 w_1}{\partial y^2} + a_3\frac{\partial^2 w_1}{\partial z^2} = 0, \quad \mathbf{r}\in V,\ t>0; \tag{9.1}$$

$$\lambda_1 \left.\frac{\partial w_1}{\partial x}\right|_{x=0} - \alpha w_1|_{x=0} = \Psi_1(\mathbf{r},t) - \alpha T_0, \quad 0<y<l_2,\ 0<z<l_3,\ t>0; \tag{9.2}$$

$$-\lambda_1 \left.\frac{\partial w_1}{\partial x}\right|_{x=l_1} - \alpha w_1|_{x=l_1} = \Psi_1(\mathbf{r},t) - \alpha T_0, \quad 0<y<l_2,\ 0<z<l_3,\ t>0; \tag{9.3}$$

$$\lambda_2 \left.\frac{\partial w_1}{\partial y}\right|_{y=0} - \alpha w_1|_{y=0} = 0, \quad 0<x<l_1,\ 0<z<l_3,\ t>0; \tag{9.4}$$

$$-\lambda_2 \left.\frac{\partial w_1}{\partial y}\right|_{y=l_2} - \alpha w_1|_{y=l_2} = 0, \quad 0<x<l_1,\ 0<z<l_3,\ t>0; \tag{9.5}$$

$$\lambda_3 \left.\frac{\partial w_1}{\partial z}\right|_{z=0} - \alpha w_1|_{z=0} = 0, \quad 0<x<l_1,\ 0<y<l_2,\ t>0; \tag{9.6}$$

$$-\lambda_3 \frac{\partial w_1}{\partial z}\bigg|_{z=l_3} - \alpha w_1|_{z=l_3} = 0, \quad 0 < x < l_1,\ 0 < y < l_2,\ t > 0. \tag{9.7}$$

Задачи для функций $w_2(\mathbf{r},t)$ и $w_3(\mathbf{r},t)$ выглядят аналогичным образом и отдельно мы их записывать не будем.

Используя метод разделения переменных для решения задачи (9) $w_1(x,y,z,t) = X(x,t)P(y,z)$, получим следующую задачу на собственные функции $P(y,z)$ и собственные значения λ^2:

$$a_2 \frac{\partial^2 P}{\partial y^2} + a_3 \frac{\partial^2 P}{\partial z^2} + \lambda^2 P = 0, \quad 0 < y < l_2,\ 0 < z < l_3; \tag{10.1}$$

$$\lambda_2 \frac{\partial P}{\partial y}\bigg|_{y=0} - \alpha P|_{y=0} = 0, \quad \lambda_2 \frac{\partial P}{\partial y}\bigg|_{y=l_2} + \alpha P|_{y=l_2} = 0; \tag{10.2}$$

$$\lambda_3 \frac{\partial P}{\partial z}\bigg|_{z=0} - \alpha P|_{z=0} = 0, \quad \lambda_3 \frac{\partial P}{\partial z}\bigg|_{z=l_3} + \alpha P|_{z=l_3} = 0. \tag{10.3}$$

Решение задачи (10) снова будем проводить методом разделения переменных $P(y,z) = Y(y)Z(z)$:

$$a_2 Y'' + \beta_2^2 Y = 0, \quad \lambda_2 Y'|_{y=0} - \alpha Y|_{y=0} = 0, \quad \lambda_2 Y'|_{y=l_2} + \alpha Y|_{y=l_2} = 0; \tag{11.1}$$

$$a_3 Z'' + \beta_3^2 Z = 0, \quad \lambda_3 Z'|_{z=0} - \alpha Z|_{z=0} = 0, \quad \lambda_3 Z'|_{z=l_3} + \alpha Z|_{z=l_3} = 0; \tag{11.2}$$

$$\beta_2^2 + \beta_3^2 = \lambda^2, \tag{11.3}$$

где традиционно штрихи означают производные.

Задача (11.1) на собственные функции Y и собственные значения β_2 имеет общее решение

$$Y(y) = C_1 \cos\left(\frac{\beta_2}{\sqrt{a_2}} y\right) + C_2 \sin\left(\frac{\beta_2}{\sqrt{a_2}} y\right),$$

а постоянные интегрирования C_1 и C_2 определяются из граничных условий в (11.1) и связаны соотношением $C_1 = \frac{\lambda_2}{\sqrt{a_2}} \frac{\beta_2}{\alpha} C_2$. Собственные значения β_2 при этом определяются из численного решения трансцендентного уравнения

$$\operatorname{ctg}\left(\frac{\beta_2}{\sqrt{a_2}} l_2\right) = \frac{1}{2}\left[\frac{\lambda_2}{\sqrt{a_2}} \frac{\beta_2}{\alpha} - \frac{\sqrt{a_2}}{\lambda_2} \frac{\alpha}{\beta_2}\right], \tag{12}$$

имеющего бесконечное количество корней $\beta_{2,m}$.

Аналогично решается и задача (11.2). Более того, решая задачу (9) для функций $w_2(\mathbf{r},t)$ и $w_3(\mathbf{r},t)$ тем же способом, мы получим аналогичное выражение и для функции $X(x)$. Таким образом, мы можем записать собственные функции задачи (11) в следующем самом общем виде:

$$X_{i,m}(x_i) = D_i \left[\frac{\lambda_i}{\sqrt{a_i}} \frac{\beta_{i,m}}{\alpha} \cos\left(\frac{\beta_{i,m}}{\sqrt{a_i}} x_i\right) + \sin\left(\frac{\beta_{i,m}}{\sqrt{a_i}} x_i\right)\right], \tag{13}$$

где D_i — произвольные, например равные единице, постоянные интегрирования, координаты x, y, z переобозначены как x_i $(i = 1, 2, 3)$, а собственные значения $\beta_{i,m}$ являются корнями уравнения (12):

$$\operatorname{ctg}\left(\frac{\beta_{i,m}}{\sqrt{a_i}} l_i\right) = \frac{1}{2}\left[\frac{\lambda_i}{\sqrt{a_i}} \frac{\beta_{i,m}}{\alpha} - \frac{\sqrt{a_i}}{\lambda_i} \frac{\alpha}{\beta_{i,m}}\right].$$

Нетрудно показать, что собственные функции X_i (13) ортогональны на отрезках $0 < x_i < l_i$, а их квадрат нормы определяется выражением

$$\|X_{i,m}(x_i)\|^2 = \frac{1}{2}\left[l_i + \frac{2\lambda_i a_i \alpha}{\beta_{i,m}^2 \lambda_i^2 + a_i \alpha^2}\right].$$

В свою очередь собственные функции задачи (10), которые определяются выражением

$$P_{nk}(x_2, x_3) = D_{nk}\left[\frac{\lambda_2}{\sqrt{a_2}} \frac{\beta_{2,n}}{\alpha} \cos\left(\frac{\beta_{2,n}}{\sqrt{a_2}} x_2\right) + \sin\left(\frac{\beta_{2,n}}{\sqrt{a_2}} x_2\right)\right] \times \left[\frac{\lambda_3}{\sqrt{a_3}} \frac{\beta_{3,k}}{\alpha} \cos\left(\frac{\beta_{3,k}}{\sqrt{a_3}} x_3\right) + \sin\left(\frac{\beta_{3,k}}{\sqrt{a_3}} x_3\right)\right],$$

ортогональны в прямоугольнике $(0 < x_2 < l_2) \times (0 < x_3 < l_3)$, а их квадрат нормы

$$\|P_{nk}(x_2, x_3)\|^2 = \|X_{2,n}(x_2)\|^2 \|X_{3,k}(x_3)\|^2.$$

Из (9), помимо задачи (10) на собственные функции $P(y,z)$ и собственные значения λ^2, мы получаем и уравнение

$$a_1 \frac{\partial^2 X(x_1,t)}{\partial x_1^2} - \lambda^2 X(x_1,t) = 0,$$

решением которого при известных собственных значениях λ_{nk} является функция

$$X_{nk}(x_1,t) = A_{nk}(t) \exp\left\{\frac{\lambda_{nk}}{\sqrt{a_1}} x_1\right\} + B_{nk}(t) \exp\left\{-\frac{\lambda_{nk}}{\sqrt{a_1}} x_1\right\}.$$

Следовательно, решение задачи (9) имеет вид:

$$w_1(x_1,x_2,x_3,t) = \sum_{n,k=1}^{\infty} \left\{\left[A_{nk}(t) \exp\left\{\frac{\lambda_{nk}}{\sqrt{a_1}} x_1\right\} + B_{nk}(t) \exp\left\{-\frac{\lambda_{nk}}{\sqrt{a_1}} x_1\right\}\right] \times \left[\frac{\lambda_2}{\sqrt{a_2}} \frac{\beta_{2,n}}{\alpha} \cos\left(\frac{\beta_{2,n}}{\sqrt{a_2}} x_2\right) + \sin\left(\frac{\beta_{2,n}}{\sqrt{a_2}} x_2\right)\right] \times \left[\frac{\lambda_3}{\sqrt{a_3}} \frac{{}_{3,k}}{\alpha} \cos\left(\frac{\beta_{3,k}}{\sqrt{a_3}} x_3\right) + \sin\left(\frac{\beta_{3,k}}{\sqrt{a_3}} x_3\right)\right]\right\}. \tag{14}$$

Коэффициенты $A_{nk}(t)$ и $B_{nk}(t)$ зависят от времени, так как они определяются из неоднородных граничных условий третьего рода (9.2), (9.3) с зависящими от времени правыми частями.

Для нахождения коэффициентов $A_{nk}(t)$ и $B_{nk}(t)$ подставим $w_1(x_1=0,x_2,x_3,t)$ и $w_1(x_1=l_1,x_2,x_3,t)$, выраженные из (14), в (9.2) и (9.3). Умножим получившиеся равенства на собственные функции $P_{qs}(x_2,x_3)$ с индексами q,s и проинтегрируем по x_2 в пределах от 0 до l_2, а по x_3 — в пределах от 0 до l_3. В силу ортогональности собственных функций, все члены получившихся рядов, кроме члена при $n=q$ и $k=s$, будут равны нулю. В результате получим систему уравнений для нахождения искомых коэффициентов:

$$\begin{cases} A_{nk}(t)\left[\lambda_1\dfrac{\lambda_{nk}}{\sqrt{a_1}}-\alpha\right]+ \\ \qquad +B_{nk}(t)\left[-\lambda_1\dfrac{\lambda_{nk}}{\sqrt{a_1}}-\alpha\right]=\widetilde{\Psi}_1(t) \\ A_{nk}(t)\left[\lambda_1\dfrac{\lambda_{nk}}{\sqrt{a_1}}-\alpha\right]\exp\left\{\dfrac{\lambda_{nk}}{\sqrt{a_1}}l_1\right\}+ \\ +B_{nk}(t)\left[-\lambda_1\dfrac{\lambda_{nk}}{\sqrt{a_1}}-\alpha\right]\exp\left\{-\dfrac{\lambda_{nk}}{\sqrt{a_1}}l_1\right\}=\widetilde{\Psi}_2(t), \end{cases} \tag{15}$$

где введено обозначение

$$\widetilde{\Psi}_{1,2}(t)= \\ =\frac{1}{\|P_{nk}\|^2}\iint\limits_0^{l_2,l_3}\left\{\left[\Psi_{1,2}\left(\begin{matrix}x=0\\x=l_1\end{matrix},\xi_2,\xi_3,t\right)-\alpha T_0\right]\times\right. \\ \times\left[\frac{\lambda_2}{\sqrt{a_2}}\frac{\beta_{2,n}}{\alpha}\cos\left(\frac{\beta_{2,n}}{\sqrt{a_2}}\xi_2\right)+\sin\left(\frac{\beta_{2,n}}{\sqrt{a_2}}\xi_2\right)\right]\times \\ \left.\times\left[\frac{\lambda_3}{\sqrt{a_3}}\frac{\beta_{3,k}}{\alpha}\cos\left(\frac{\beta_{3,k}}{\sqrt{a_3}}\xi_3\right)+\sin\left(\frac{\beta_{3,k}}{\sqrt{a_3}}\xi_3\right)\right]\right\}d\xi_2 d\xi_3. \tag{16}$$

Решение системы (15) имеет следующий простой вид:

$$A_{nk}(t),B_{nk}(t)= \\ =\frac{\widetilde{\Psi}_1(t)\left[\lambda_1\dfrac{\lambda\lambda_{nk}}{\sqrt{a_1}}\mp\alpha\right]\exp\left\{\mp\dfrac{\lambda_{nk}}{\sqrt{a_1}}l_1\right\}+}{-\left[\lambda_1\dfrac{\lambda_{nk}}{\sqrt{a_1}}+\alpha\right]^2\exp\left\{\dfrac{\lambda_{nk}}{\sqrt{a_1}}l_1\right\}+} \\ \frac{+\widetilde{\Psi}_2(t)\left[\lambda_1\dfrac{\lambda_{nk}}{\sqrt{a_1}}\pm\alpha\right]}{+\left[\lambda_1\dfrac{\lambda_{nk}}{\sqrt{a_1}}-\alpha\right]^2\exp\left\{\dfrac{-\lambda_{nk}}{\sqrt{a_1}}l_1\right\}}. \tag{17}$$

Таким образом, решение задачи (9) $w_1(\mathbf{r},t)$ определяется выражением (14), где коэффициенты $A_{nk}(t)$ и $B_{nk}(t)$ задаются (17), $\lambda_{nk}^2=\beta_{2,n}^2+\beta_{3,k}^2$, а $\beta_{i,m}$ являются корнями уравнения (12).

Напомним, что решение задачи (7) — $w(\mathbf{r},t)=w_1(\mathbf{r},t)+w_2(\mathbf{r},t)+w_3(\mathbf{r},t)$ Процедура нахождения $w_2(\mathbf{r},t)$ и $w_3(\mathbf{r},t)$ аналогична нахождению $w_1(\mathbf{r},t)$ и отдельно нами проводиться не будет. Отметим лишь, что сами результаты могут быть получены из (14), (17) циклической перестановкой координат x_1,x_2,x_3.

Решение задачи (8) будем проводить методом редукции, представив $v(\mathbf{r},t)=v_1(\mathbf{r},t)+v_2(\mathbf{r},t)$. Подстановка этого выражения в (8) приведет к однородному дифференциальному уравнению в частных производных с неоднородным начальным и однородным граничным условием для функции $v_1(\mathbf{r},t)$:

$$\frac{\partial v_1}{\partial t}=a_1\frac{\partial^2 v_1}{\partial x_1^2}+a_2\frac{\partial^2 v_1}{\partial x_2^2}+a_3\frac{\partial^2 v_1}{\partial x_3^2}, \\ \mathbf{r}\in V,\ t>0, \tag{18.1}$$

$$v_1(\mathbf{r},t=0)=T_0-w(\mathbf{r},t=0),\quad \mathbf{r}\in V; \tag{18.2}$$

$$\lambda_n\left.\frac{\partial v_1}{\partial n}\right|_S-\alpha v_1|_S=0,\quad \mathbf{r}\in S,\ t>0 \tag{18.3}$$

и неоднородному дифференциальному уравнению в частных производных с однородными начальным и граничным условиями для функции $v_2(\mathbf{r},t)$:

$$\frac{\partial v_2}{\partial t}=a_1\frac{\partial^2 v_2}{\partial x_1^2}+a_2\frac{\partial^2 v_2}{\partial x_2^2}+a_3\frac{\partial^2 v_2}{\partial x_3^2}+ \\ +\frac{F(\mathbf{r},t)}{c\rho}-\frac{\partial w}{\partial t},\quad \mathbf{r}\in V,\ t>0, \tag{19.1}$$

$$v_2(\mathbf{r},t=0)=0,\quad \mathbf{r}\in V; \tag{19.2}$$

$$\lambda_n\left.\frac{\partial v_2}{\partial n}\right|_S-\alpha v_2|_S=0,\quad \mathbf{r}\in S,\ t>0. \tag{19.3}$$

Для решения (18) воспользуемся методом разделения переменных $v_1(\mathbf{r},t)=R(\mathbf{r})Q(t)$:

$$\frac{1}{Q}\frac{\partial Q}{\partial t}=\frac{1}{R}\left[a_1\frac{\partial^2 R}{\partial x_1^2}+a_2\frac{\partial^2 R}{\partial x_2^2}+a_3\frac{\partial^2 R}{\partial x_3^2}\right]=-\lambda^2\Rightarrow$$

$$\Rightarrow\begin{cases}\dfrac{dQ}{dt}+\lambda^2 Q=0 & (20.1)\\ a_1\dfrac{\partial^2 R}{\partial x_1^2}+a_2\dfrac{\partial^2 R}{\partial x_2^2}+a_3\dfrac{\partial^2 R}{\partial x_3^2}+\lambda^2 R=0, & (20.2)\end{cases}$$

$$\lambda_n\left.\frac{\partial R}{\partial n}\right|_S Q-\alpha R|_S Q=0\Rightarrow \\ \Rightarrow\lambda_n\left.\frac{\partial R}{\partial n}\right|_S-\alpha R|_S=0\quad\text{при}\quad Q\neq 0. \tag{20.3}$$

Уравнение (20.2) с однородным граничным условием третьего рода (20.3) является задачей на собственные значения λ^2 и собственные функции $R(x_1,x_2,x_3)$, решение которой проводится методом разделения переменных $R(x_1,x_2,x_3)==X(x_1)Y(x_2)Z(x_3)$:

$$a_1X''+\beta_1^2X=0, \\ \lambda_1X'|_{x_1=0}-\alpha X|_{x_1=0}=0, \\ \lambda_1X'|_{x_1=l_1}+\alpha X|_{x_1=l_1}=0; \tag{21.1}$$

$$a_2Y''+\beta_2^2Y=0, \\ \lambda_2Y'|_{x_2=0}-\alpha Y|_{x_2=0}=0, \\ \lambda_2Y'|_{x_2=l_2}+\alpha Y|_{x_2=l_2}=0; \tag{21.2}$$

$$a_3Z''+\beta_3^2Z=0, \\ \lambda_3Z'|_{x_3=0}-\alpha Z|_{x_3=0}=0, \\ \lambda_3Z'|_{x_3=l_3}+\alpha Z|_{x_3=l_3}=0; \tag{21.3}$$

$$\beta_1^2 + \beta_2^2 + \beta_3^2 = \lambda^2. \tag{21.4}$$

Полученные задачи (21) полностью аналогичны задачам (11), а их решение определяется выражением (13).

В свою очередь собственные функции задачи (20.2), которые определяются выражением

$$R_{mnk}(x_1,x_2,x_3) = \\ = D_{mnk}\left[\frac{\lambda_1}{\sqrt{a_1}}\frac{\beta_{1,m}}{\alpha}\cos\left(\frac{\beta_{1,m}}{\sqrt{a_1}}x_1\right)+\sin\left(\frac{\beta_{1,m}}{\sqrt{a_1}}x_1\right)\right]\times \\ \times\left[\frac{\lambda_2}{\sqrt{a_2}}\frac{\beta_{2,n}}{\alpha}\cos\left(\frac{\beta_{2,n}}{\sqrt{a_2}}x_2\right)+\sin\left(\frac{\beta_{2,n}}{\sqrt{a_2}}x_2\right)\right]\times \\ \times\left[\frac{\lambda_3}{\sqrt{a_3}}\frac{\beta_{3,k}}{\alpha}\cos\left(\frac{\beta_{3,k}}{\sqrt{a_3}}x_3\right)+\sin\left(\frac{\beta_{3,k}}{\sqrt{a_3}}x_3\right)\right], \tag{22}$$

ортогональны в параллелепипеде $(0 < x_1 < l_1) \times (0 < x_2 < l_2) \times (0 < x_3 < l_3)$, а их квадрат нормы —

$$\|P_{mnk}(x_1,x_2,x_3)\|^2 = \\ = \|X_{1,m}(x_1)\|^2\|X_{2,n}(x_2)\|^2\|X_{3,k}(x_3)\|^2.$$

Решением уравнения (20.1) будет функция $Q(t) = \exp\{-\lambda^2 t\}$, а решением $v_1(\mathbf{r},t)$ задачи (18) будет ряд по всем собственным функциям

$$v_1(x_1,x_2,x_3,t) = \\ = \sum_{m,n,k=1}^{\infty} C_{mnk}\exp\left\{-\left(\beta_{1,m}^2+\beta_{2,n}^2+\beta_{3,k}^2\right)t\right\}\times \\ \times R_{mnk}(x_1,x_2,x_3).$$

При этом коэффициенты должны удовлетворять начальному условию (18.3), тогда как граничное условие (18.3) уже было нами использовано для определения собственных функций R_{mnk}, т. е. коэффициенты C_{mnk} будут иметь вид:

$$C_{mnk} = \frac{1}{\|R_{mnk}\|^2}\iiint\limits_0^{l_1,l_2,l_3}[T_0 - w(\xi_1\xi_{,2}\,\xi_{,3})]\times \\ \times R_{mnk}(\xi_1,\xi_2,\xi_3)d\xi_1 d\xi_2 d\xi_3.$$

Решение неоднородного дифференциального уравнения в частных производных с однородными начальным и граничным условиями (19) будем проводить путем разложения функции $v_2(\mathbf{r},t)$ в ряд по собственным функциям $\check{R}_{mnk}(x_1,x_2,x_3)$, считая, что для определения собственных функций использовано граничное условие (19.3), т. е. $\check{R}_{mnk}(x_1,x_2,x_3) \equiv R_{mnk}(x_1,x_2,x_3)$, где R_{mnk} определяется (22). В аналогичный ряд разложим и функцию $f(\mathbf{r},t) = \frac{F(\mathbf{r},t)}{c\rho} - \frac{\partial w}{\partial t}$:

$$v_2(x_1,x_2,x_3,t) = \\ = \sum_{m,n,k=1}^{\infty} v_{2,mnk}(t)R_{mnk}(x_1,x_2,x_3), \tag{23.1}$$

$$f(x_1,x_2,x_3,t) = \\ = \sum_{m,n,k=1}^{\infty} f_{mnk}(t)R_{mnk}(x_1,x_2,x_3), \tag{23.2}$$

а $f_{mnk}(t)$ — коэффициенты Фурье при разложении $f(\mathbf{r},t)$ по собственным функциям:

$$f_{mnk}(t) = \frac{1}{\|R_{mnk}\|^2}\iiint\limits_0^{l_1,l_2,l_3} f(\xi_1,\xi_2,\xi_3)\times \\ \times R_{mnk}(\xi_1,\xi_2,\xi_3)d\xi_1 d\xi_2 d\xi_3. \tag{24}$$

Для определения $v_{2,mnk}(t)$ подставим (23) в (19.1), (19.2) и с учетом

$$a_1\frac{\partial^2 v_2}{\partial x^2} + a_2\frac{\partial^2 v_2}{\partial y^2} + a_3\frac{\partial^2 v_2}{\partial z^2} = \\ = \sum_{m,n,k=1}^{\infty} v_{2,mnk}(t)[-(\beta_{1,m}^2+\beta_{2,n}^2+\beta_{3,k}^2)\times \\ \times R_{mnk}(x_1,x_2,x_3)]$$

преобразуем (19.1), (19.2) к виду (точка означает производную по времени):

$$\frac{\partial v_2}{\partial t} - \left[a_1\frac{\partial^2 v_2}{\partial x^2} + a_2\frac{\partial^2 v_2}{\partial y^2} + a_3\frac{\partial^2 v_2}{\partial z^2} + f\right] = \\ = \sum_{m,n,k=1}^{\infty}[\dot{v}_{2,mnk}(t) + (\beta_{1,m}^2+\beta_{2,n}^2+\beta_{3,k}^2)v_{2,mnk}(t) - \\ - f_{mnk}(t)]R_{mnk}(x_1,x_2,x_3),$$

$$\sum_{m,n,k=1}^{\infty} v_{2,mnk}(t=0)R_{mnk}(x_1,x_2,x_3) = 0.$$

В силу ортогональности собственных функций R_{mnk} мы получили задачу Коши для неоднородного дифференциального уравнения 1-го порядка с однородным начальным условием:

$$\dot{v}_{2,mnk}(t) + (\beta_{1,m}^2+\beta_{2,n}^2+\beta_{3,k}^2)v_{2,mnk}(t) - f_{mnk}(t) = 0, \\ v_{2,mnk}\,(t=0) = 0.$$

Решением этой задачи будет функция

$$v_{2,mnk}(t) = \int\limits_0^t f_{mnk}(t)\times \\ \times\exp\{-(\beta_{1,m}^2+\beta_{2,n}^2+\beta_{3,k}^2)(t-\tau)\}d\tau, \tag{25}$$

а окончательное решение задачи (19) мы получим, подставив (24) в (25), а (25) в (23.1):

$$v_2(x_1,x_2,x_3,t) = \sum_{m,n,k=1}^{\infty}\frac{1}{\|R_{mnk}\|^2}\times \\ \times\int\limits_0^{l_1,l_2,l_3,t}\Big[f(\xi_1,\xi_2,\xi_3,\tau)R_{mnk}(\xi_1,\xi_2,\xi_3)d\xi_1 d\xi_2 d\xi_3\times \\ \times\exp\{-(\beta_{1,m}^2+\beta_{2,n}^2+\beta_{3,k}^2)(t-\tau)\}d\tau\Big]R_{mnk}(x_1,x_2,x_3).$$

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе показано, что тепловое действие рентгеновского синхротронного излучения на кристаллы, обладающие анизотропными тепловыми свойствами и находящиеся в условиях теплообмена с окружающей средой, описывается уравнением теплопроводности с источниками и граничными условиями третьего рода. На примере кристалла, имеющего форму прямоугольного параллелепипеда, найдено аналитическое решение такого уравнения.

Полученные результаты, по сути, представляют собой аналитическое решение уравнения теплопроводности с источником и граничными условиями третьего рода в орторотропном прямоугольном параллелепипеде и имеют как фундаментальное значение, так и широкое прикладное применение в задачах теплопроводности анизотропных сред, таких как теплопроводность космических и авиационных конструкционных материалов.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке РФФИ (гранты № 19-02-00483, 19-52-12029).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Хараджа Ф. Н.* Общий курс рентгенотехники. М.—Л.: Госэнергоиздат, 1956.
2. *Комптон А., Алисон С.* Рентгеновские лучи. Теория и эксперимент. Л.—М.: ОГИЗ, 1941.
3. *Жданов Г. С., Уманский Я. С.* Рентгенография металлов. Часть 1. М.—Л.: ОНТИ НКТП СССР, 1937; Часть 2. М.—Л.: ОНТИ НКТП СССР, 1938.
4. *Жданов Г. С.* Основы рентгеновского структурного анализа. М.—Л.: ГИТТЛ, 1940.
5. *Китайгородский А. И.* Рентгеноструктурный анализ. М.—Л.: ГИТТЛ, 1950.
6. *Блохин М. А.* Физика рентгеновских лучей. М.: ГИТТЛ, 1957.
7. *Гинье А.* Рентгенография кристаллов. М.: ГИФМЛ, 1961.
8. *Ac V., Perichta P., Korytar D., Mikulik P.* // Springer Series in Optical Science. 2008. **137**. P. 513.
9. *Бушуев В. А.* // Изв. РАН. Сер. физ. 2013. **77**, № 1. С. 19. (*Bushuev V. A.* // Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics. 2013. **77**, N 1. P. 15.)
10. *Бушуев В. А.* // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. 2016. № 11. С. 73. (*Bushuev V. A.* // Journal of Surface Investigation: X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques. 2016. N 6. P. 1179.)
11. *Сиротин Ю. И., Шаскольская М. П.* Основы кристаллофизики. М.: Наука, 1979.
12. *Бушуев В. А., Орешко А. П.* // Изв. РАН. Сер. физ. 2004. **68**, № 4. С. 550. (*Bushuev V. A., Oreshko A. P.* // Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics. 2004. **68**, N 4. P. 624.)
13. *Бушуев В. А., Орешко А. П.* // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. 2007. № 5. С. 21 (*Bushuev V. A., Oreshko A. P.* // Journal of Surface Investigation: X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques. 2007. N 3. P. 240.)
14. *Bushuev V. A.* // J. Synchrotron Rad. 2008. **15**. P. 495.
15. *Тихонов А. Н., Самарский А. А.* Уравнения математической физики. М.: Изд-во МГУ, 1999.
16. *Карслоу Г., Егер Д.* Теплопроводность твердых тел. М.: Наука, 1964.
17. *Лыков А. В.* Теория теплопроводности. М.: Высшая школа, 1967.
18. *Свешников А. Г., Боголюбов А. Н., Кравцов В. В.* Лекции по математической физике. М.: Изд-во МГУ, 1993.
19. *Карташов Э. М.* Аналитические методы в теории теплопроводности твердых тел. М.: Высшая школа, 2001.
20. *Миснар А.* Теплопроводность твердых тел, жидкостей, газов и их композиций. М.: Мир, 1968.
21. Физические величины: Справочник / Под ред. И. С. Григорьева, Е. З. Мейлихова. М.: Энергоатомиздат, 1991.
22. *Формалев В. Ф.* Теплопроводность анизотропных тел. Часть 1. Аналитические методы решения задач. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2014.

X-Ray Heating of Perfect Crystals: Problem Statement and Analytical Solution

A. P. Oreshko

Department of Solid State Physics, Faculty of Physics, Lomonosov Moscow State University. Moscow 119991, Russia.
E-mail: ap.oreshko@physics.msu.ru.

Analytical expressions are found that in the most general form describe the space–time distribution of the thermal field in an anisotropic crystal during heat exchange with the environment under the influence of synchrotron X-ray radiation or X-ray free-electron laser pulses with an arbitrary space-time structure.

Keywords: X-ray free-electron laser heating, X-ray heating, heat conductivity, anisotropic media.
PACS: 02.30.Jr, 44.05.+e, 44.40.+a.
Received 27 January 2020.

English version: *Moscow University Physics Bulletin*. 2020. **75**, No. 3. Pp. 249–256.

Сведения об авторе

Орешко Алексей Павлович — доктор физ.-мат. наук, доцент, профессор; тел.: (495) 939-12-26, e-mail: ap.oreshko@physics.msu.ru.