

РАЗРАБОТКА НОВЫХ ТЕОРЕТИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ ОБРАЗОВАНИЯ КАСКАДОВ И СУБКАСКАДОВ АТОМНЫХ СТОЛКНОВЕНИЙ В ОБЛУЧАЕМЫХ ТВЕРДЫХ ТЕЛАХ

Е. В. Метелкин, А. И. Рязанов, Е. В. Семенов*

*Российский научный центр «Курчатовский институт»
123182, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 27 февраля 2008 г.

Разрабатывается новая теоретическая модель для исследования образования каскадов и субкаскадов атомных столкновений в облучаемых твердых телах. Модель основана на аналитическом рассмотрении упругих столкновений между движущимися атомами, выбитыми из узлов кристаллической решетки, и неподвижными атомами решетки. Рассмотрение основано на использовании линейного кинетического уравнения Больцмана, описывающего замедление первично выбитых атомов (ПВА) в облучаемых твердых телах. В рамках развиваемой модели проанализированы законы сохранения для полного числа и кинетической энергии движущихся атомов, вытекающие из кинетического уравнения Больцмана. Получено аналитическое решение для стационарного кинетического уравнения Больцмана, описывающее замедление ПВА с заданным источником их рождения. Проанализированы также кинетическое уравнение для движущихся атомов и соответствующие законы сохранения с учетом энергии связи атомов в узлах кристаллической решетки. Получено приближенное стационарное решение кинетического уравнения для ПВА с учетом энергии связи атомов в узлах кристаллической решетки. Получен критерий для определения пороговой энергии образования субкаскадов в облучаемом твердом теле. На его основе проведены расчеты пороговой энергии образования субкаскадов с использованием потенциала Томаса – Ферми. Приведены формулы для определения средних размеров и числа субкаскадов, образующихся в твердом теле, в зависимости от энергии ПВА.

PACS: 61.72.Bb, 61.72.Cc, 61.80.Az

1. ВВЕДЕНИЕ

Облучение твердых тел быстрыми частицами (нейтронами, заряженными ионами, электронами) приводит к тому, что атомы кристаллической решетки, получившие от налетающей частицы энергию, большую некоторой пороговой величины, вылетают из своих равновесных положений. В дальнейшем обмен энергией в результате упругих столкновений между первично выбитым атомом (ПВА) и атомами, находящимися в узлах кристаллической решетки, приводит к образованию каскада атомных упругих столкновений. Для ПВА, обладающего некоторым пороговым значением энергии E_{sf} , каскад атомных столкновений может распадаться на ряд непе-

рекрывающихся между собой областей, называемых субкаскадами. В результате развития каскадов и субкаскадов в твердом теле в них образуются точечные дефекты: вакансии и межузельные атомы, определяющие накопление радиационных повреждений в облучаемых материалах, которые ведут к изменениям их физико-механических свойств.

Число и структура образующихся каскадов атомных столкновений (а также их размер и число точечных дефектов в каскадах) зависят от физических свойств твердых тел и энергетического спектра ПВА. Характерным временем для развития субкаскадов является величина порядка нескольких пикосекунд, а размер зависит от энергии ПВА и определяется значениями порядка 1–100 нм. Эти факторы существенно затрудняют проведение эксперимен-

*E-mail: ryazanoff@comail.ru

тальных исследований образования каскадов в облучаемых твердых телах. Тем не менее, большой объем информации о развитии каскадов и субкаскадов можно почерпнуть с помощью методов математического моделирования: метода Монте-Карло [1–7] и метода молекулярной динамики [8–13] (например, код MARLOWE или TRIM), используя для этого потенциалы двухчастичного взаимодействия между атомами. Несмотря на то что данный подход для анализа развития каскадов атомных столкновений позволяет изучить процесс их формирования, для получения адекватных результатов при больших энергиях ПВА он требует большого числа статистических данных, что приводит к значительным временным и вычислительным затратам. Метод молекулярной динамики основан на анализе движения большого числа атомов с помощью численного решения системы уравнений движения для этих атомов, которые упругим образом взаимодействуют друг с другом, с учетом того обстоятельства, что один из них получил некоторую кинетическую энергию и импульс в определенном направлении. Силы, действующие между атомами, обычно определяются классическими парными потенциалами взаимодействия, однако в некоторых случаях для определения потенциалов взаимодействия между атомами используются квантовомеханические подходы. К недостаткам данного метода следует отнести очень высокие требования к вычислительным мощностям современных компьютеров для расчетов с увеличением энергии ПВА, а также ограничения на полное число атомов, участвующих в описании развития каскадов и субкаскадов в кристаллической решетке твердого тела.

В настоящей работе развивается новая теоретическая модель, описывающая торможение движущихся выбитых атомов в твердом теле и формулирующая кинетический критерий образования субкаскадов с определением граничной энергии и числа субкаскадов в зависимости от энергии ПВА. Предлагаемый подход основывается на использовании линейного кинетического уравнения Больцмана для движущихся атомов, которое ранее применялось для расчета торможения быстрых частиц и образования первичных радиационных дефектов [14–16] и которое определенным образом модифицируется здесь для описания развития субкаскадов атомных столкновений в твердых телах. Важным результатом такого подхода является тот факт, что сам критерий образования субкаскадов в твердых телах удается сформулировать в виде простого аналитического выражения, позволяющего определить граничную

энергию их образования. Некоторую неточность в ее определении, которая связана с неизбежными упрощениями, возникающими по ходу теоретических вычислений, легко устранить, проведя сопоставление теории с результатами математического моделирования и экспериментальными исследованиями образования субкаскадов в твердых телах. Таким образом можно скорректировать полученные результаты и применять далее предложенный в этой работе критерий образования субкаскадов для теоретического анализа образования субкаскадов в любом твердом теле, которое облучается потоками быстрых частиц и состоит из атомов одного сорта.

2. КИНЕТИЧЕСКОЕ УРАВНЕНИЕ, ОПИСЫВАЮЩЕЕ ЗАМЕДЛЕНИЕ ПЕРВИЧНО ВЫБИТЫХ АТОМОВ В ОБЛУЧАЕМЫХ ТВЕРДЫХ ТЕЛАХ

В настоящей работе будем рассматривать процессы образования каскадов и субкаскадов в твердом теле, состоящем из атомов одного сорта. Для простоты в начале будем полагать, что энергия связи атомов в узлах решетки равна нулю ($\varepsilon_d = 0$).

Кинетическое уравнение, описывающее нестационарное энергетическое распределение движущихся атомов от мгновенного моноэнергетического источника без учета их соударений между собой, имеет следующий вид [17]:

$$\begin{aligned} \frac{\partial f(E, t)}{\partial t} + \Sigma(E)\Phi(E, t) = & \\ = \int_E^{E_0} dE' \Sigma(E' \rightarrow E)\Phi(E', t) + & \\ + \int_E^{E_0} dE' \Sigma(E' \rightarrow E' - E)\Phi(E', t) + & \\ + N_0 \delta(E - E_0)\delta(t). & \quad (1) \end{aligned}$$

Здесь $f(E, t) dE$ — число движущихся атомов с энергией E в интервале dE в момент времени t в единице объема, $\Phi(E, t) = v f(E, t)$ — поток движущихся атомов, v — скорость атомов, $\Sigma(E' \rightarrow E)$ — макроскопическое сечение упругого рассеяния атомов, $\Sigma(E)$ — полное макроскопическое сечение упругого рассеяния атомов, $\delta(x)$ — дельта-функция Дирака, E_0 — максимальная энергия ПВА, N_0 — начальное число ПВА.

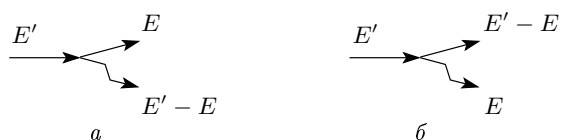


Рис. 1. Схематичное представление упругого рассеяния двух атомов для двух случаев: *a* — движущийся атом с энергией E' в результате упругого соударения с атомом кристаллической решетки переходит в состояние с энергией E , передавая атому, находящемуся в узле кристаллической решетки, энергию $E' - E$; *б* — движущийся атом с энергией E' в результате упругого соударения с атомом кристаллической решетки переходит в состояние с энергией $E' - E$, передавая атому, находящемуся в узле кристаллической решетки, энергию E

Первый интеграл, стоящий в правой части кинетического уравнения (1), описывает переход движущегося атома с энергией E' в состояние с энергией E . При этом в результате упругого рассеяния выбитый атом получает кинетическую энергию $E' - E$ (см. рис. 1*a*). Второй интеграл описывает образование выбитого атома с энергией E , когда движущийся атом перешел в состояние с энергией $E' - E$ (см. рис. 1*б*).

Следуя работам [5, 6, 18], далее везде будем называть ПВА тот атом, который после упругого соударения в каждом случае имеет большую энергию. Атом с меньшей энергией будем называть атомом мишени (или выбитым атомом) и исключать из дальнейшего рассмотрения. Получим и проанализируем кинетическое уравнение, описывающее энергетическое распределение таким образом определенных ПВА, поскольку именно вдоль их траектории движения образуются субкаскады [5, 6, 18].

Согласно принятой выше терминологии, ПВА мы считаем тот, у которого энергия после каждого акта упругого рассеяния больше. Очевидно, при этом вклады как от первого (рис. 1*a*), так и от второго (рис. 1*б*) интеграла в кинетическое уравнение (1) нужно учитывать лишь при выполнении условия

$$E > E' - E \quad \text{или} \quad E' < 2E. \quad (2)$$

В таком случае кинетическое уравнение, описывающее энергетическое распределение ПВА, будет иметь следующий вид:

$$\begin{aligned} \frac{\partial f(E, t)}{\partial t} + \Sigma(E)\Phi(E, t) = & \\ = \eta \left(E - \frac{E_0}{2} \right) \int_E^{E_0} dE' \Sigma(E' \rightarrow E) \Phi(E', t) + & \\ + \eta \left(E - \frac{E_0}{2} \right) \int_E^{E_0} dE' \Sigma(E' \rightarrow E' - E) \Phi(E', t) + & \\ + \eta \left(\frac{E_0}{2} - E \right) \int_E^{2E} dE' \Sigma(E' \rightarrow E) \Phi(E', t) + & \\ + \eta \left(\frac{E_0}{2} - E \right) \int_E^{2E} dE' \Sigma(E' \rightarrow E' - E) \Phi(E', t) + & \\ + N_0 \delta(E - E_0) \delta(t), & \quad (3) \end{aligned}$$

где $\eta(x)$ — единичная функция Хевисайда:

$$\eta(x) = \begin{cases} 1, & x > 0, \\ 0, & x < 0. \end{cases} \quad (4)$$

3. ЗАКОНЫ СОХРАНЕНИЯ, ВЫТЕКАЮЩИЕ ИЗ КИНЕТИЧЕСКОГО УРАВНЕНИЯ ДЛЯ ДВИЖУЩИХСЯ АТОМОВ

Проанализируем законы сохранения для числа частиц и энергии, вытекающие из кинетического уравнения (3). Вводя полное число движущихся атомов $N(t)$, определяемое соотношением

$$N(t) = \int_0^{E_0} dE f(E, t), \quad (5)$$

проинтегрируем уравнение (3) по энергии от 0 до E_0 . Эта процедура приводит к следующему результату:

$$\frac{dN(t)}{dt} = N_0 \delta(t). \quad (6)$$

Из уравнения (6) вытекает закон сохранения для числа движущихся атомов ($N = N_0 = \text{const}$). Это не удивительно, так как после каждого акта взаимодействия мы следим только за атомом с большей энергией, не интересуясь (или отбрасывая) атом с меньшей энергией. Таким образом, уравнение (3) для ПВА не учитывает размножение атомов, содержащееся в уравнении (1).

Умножив далее обе части уравнения (3) на E и проинтегрировав по энергии от 0 до E_0 , получим

$$\frac{dE(t)}{dt} = - \int_0^{E_0} dE' \Sigma(E') \Delta_0(E') \Phi(E', t) + N_0 E_0 \delta(t). \quad (7)$$

Здесь введены обозначения

$$E(t) = \int_0^{E_0} dE E f(E, t), \quad (8)$$

$$\Delta_0(E') = \int_{E'/2}^{E'} dE (E' - E) P(E' \rightarrow E) + \int_0^{E'/2} dE E P(E' \rightarrow E), \quad (9)$$

а величина

$$P(E' \rightarrow E) = \frac{1}{\Sigma(E')} \Sigma(E' \rightarrow E)$$

представляет собой вероятность перехода движущегося атома при упругом рассеянии на неподвижном атоме из состояния с энергией E' в состояние с энергией E в единичный интервал энергий.

Из уравнения (7) вытекает, что закон сохранения энергии не выполняется. Подчеркнем, что он не выполняется в том смысле, что из уравнения (1) мы бы получили соотношение

$$\frac{dE(t)}{dt} = N_0 E_0 \delta(t), \quad (10)$$

т. е. энергия атомов, испущенных источником, распределяется между всеми движущимися атомами, причем так, что их полная энергия всегда остается постоянной ($E(t) = N_0 E_0 = \text{const}$).

Последнее обстоятельство также очевидно, поскольку после каждого акта упругого рассеяния мы отбрасываем атом с меньшей энергией и следим за атомом с большей энергией, который мы называем ПВА. В таком случае, очевидно, $\Delta_0(E')$ (см. (9)) представляет собой среднюю потерю энергии ПВА при отдельном упругом соударении.

Этот результат имеет простую физическую интерпретацию. Если атом с энергией E' сталкивается с атомом, находящимся в узле решетки, и приобретает энергию E , лежащую в интервале от $E'/2$ до E' , то выбитый атом имеет меньшую энергию и мы его в дальнейшем не рассматриваем. В таком случае потери энергии движущегося атома равны $E' - E$, что и отражает первое слагаемое в формуле (10).

Если же налетающий атом с энергией E' в результате взаимодействия перешел в состояние с энергией E , лежащей в интервале от 0 до $E'/2$, то большую энергию приобрел выбитый атом, за которым мы и следим в дальнейшем. В этом случае исключается из рассмотрения атом с энергией E , так что потеря энергии как раз и равна этой величине, что отражает второе слагаемое в формуле (9).

Формулу (9) можно получить и несколько иным способом. Действительно, мы сохраняем движущийся (или налетающий) атом при условии, что $E > E'/2$ (см. (2)). Потеря энергии при этом, очевидно, равна $E' - E$. Выбитый атом мы сохраняем при том же самом условии ($E > E'/2$). Потеря энергии при этом, очевидно, равна $E' - E$. В таком случае для средней потери энергии получим

$$\Delta_0(E') = \int_{E'/2}^{E'} dE (E' - E) P(E' \rightarrow E) + \int_{E'/2}^{E'} dE (E' - E) P(E' \rightarrow E' - E). \quad (11)$$

Сделав во втором интеграле в правой части замену переменной $y = E' - E$, придем к выражению (9).

Теперь определим среднюю кинетическую энергию, полученную выбитым атомом в отдельном соударении $T_0(E')$. Очевидно, что эта величина будет определяться следующим выражением:

$$T_0(E') = \int_0^{E'/2} dE E P(E' \rightarrow E) + \int_{E'/2}^{E'} dE (E' - E) P(E' \rightarrow E) \quad (12)$$

или

$$T_0(E') = \int_{E'/2}^{E'} dE (E' - E) P(E' \rightarrow E) + \int_{E'/2}^{E'} dE (E' - E) P(E' \rightarrow E' - E). \quad (13)$$

Из сопоставления соотношений (11) и (13) следует, что

$$\Delta_0(E') = T_0(E'). \quad (14)$$

Этот результат является очевидным, поскольку здесь мы не учитываем энергию связи атомов в кристаллической решетке ($\varepsilon_d = 0$).

Определим энергетический спектр выбитых атомов. Для этого в выражении (13) при интегрировании перейдем к энергии, полученной выбитым атомом:

$$T = E' - E. \quad (15)$$

Проведя указанную замену, получим

$$T_0(E') = \int_0^{E'/2} dT TP(E' \rightarrow E' - T) + \int_0^{E'/2} dT TP(E' \rightarrow T). \quad (16)$$

В этом случае энергетический спектр выбитых атомов определяется следующим выражением:

$$S(T, E') = P(E' \rightarrow E' - T) + P(E' \rightarrow T) \quad (17)$$

или

$$S(T, E') = \frac{1}{\Sigma(E')} \times \{ \Sigma(E' \rightarrow E' - T) + \Sigma(E' \rightarrow T) \}, \quad (18)$$

где величина T изменяется в следующих пределах:

$$0 \leq T \leq E'/2. \quad (19)$$

Этот спектр, как и следовало ожидать, нормирован на единицу:

$$\int_0^{E'/2} dT S(T) = 1, \quad (20)$$

в чем легко убедиться непосредственно.

4. АНАЛИТИЧЕСКОЕ РЕШЕНИЕ СТАЦИОНАРНОГО КИНЕТИЧЕСКОГО УРАВНЕНИЯ ДЛЯ ПВА

Найдем и проанализируем стационарное решение кинетического уравнения (3) для простого частного случая упругого, сферически симметричного в системе центра масс рассеяния атомов (см. [17]), когда

$$\Sigma(E' \rightarrow E) = \frac{1}{E'} \Sigma(E'), \quad 0 \leq E \leq E'. \quad (21)$$

В области энергий $E > E_0/2$ уравнение (3) в стационарном случае принимает следующий вид:

$$\Sigma(E)\Phi(E) = \int_E^{E_0} dE' \Sigma(E' \rightarrow E)\Phi(E') + \int_E^{E_0} dE' \Sigma(E' \rightarrow E' - E)\Phi(E') + N_0\delta(E - E_0). \quad (22)$$

Подставляя (21) в (22) и переходя к плотности столкновений ($\psi(E) = \Sigma(E)\Phi(E)$), получим

$$\psi(E) = 2 \int_E^{E_0} \frac{dE'}{E'} \psi(E') + N_0\delta(E - E_0). \quad (23)$$

Решение уравнения (23) будем искать в виде

$$\psi(E) = \psi_1(E) + N_0\delta(E - E_0). \quad (24)$$

Подставив (24) в (23), найдем уравнение для определения функции ψ_1 :

$$\psi_1(E) = 2 \int_E^{E_0} \frac{dE'}{E'} \psi_1(E') + \frac{2N_0}{E_0}. \quad (25)$$

Дифференцируя уравнение (27) по энергии, получим

$$\frac{d\psi_1}{dE} = -\frac{2}{E}\psi_1(E). \quad (26)$$

Решение уравнения (26) с учетом граничного условия

$$\psi_1(E_0) = \frac{2N_0}{E_0}, \quad (27)$$

вытекающего из формулы (25), приводит к следующему результату:

$$\psi_1(E) = 2N_0 \frac{E_0}{E^2}. \quad (28)$$

Следует заметить, что выражение (28) является стационарным решением уравнения (1), описывающим энергетическое распределение каскада движущихся атомов с учетом их размножения во всем энергетическом интервале от 0 до E_0 . Согласно введенному выше определению ПВА, их энергетическое распределение в области энергий $E < E_0/2$ будет отличаться от (28). Найдем это распределение.

В области энергий $E < E_0/2$ кинетическое уравнение (3) в стационарном случае принимает следующий вид:

$$\Sigma(E)\Phi(E) = \int_E^{2E} dE' \Sigma(E' \rightarrow E)\Phi(E') + \int_E^{2E} dE' \Sigma(E' \rightarrow E' - E)\Phi(E'). \quad (29)$$

Учитывая соотношение (21) и переходя к плотности соударений, получаем

$$\psi(E) = 2 \int_E^{2E} \frac{dE'}{E'} \psi(E'). \quad (30)$$

Дифференцируя равенство (30) по энергии, найдем уравнение для определения функции $\psi(E)$:

$$\frac{d\psi(E)}{dE} + \frac{2}{E}\psi(E) = \frac{2}{E}\psi(2E). \quad (31)$$

Считая правую часть уравнения (31) известной, а значение $\psi(E_0/2)$ заданной величиной, его решение можно представить в следующем виде:

$$\psi(E) = \psi\left(\frac{E_0}{2}\right) \frac{E_0}{2E} - \frac{1}{2E^2} \int_{2E}^{E_0} dE' E' \psi(E'). \quad (32)$$

Учитывая соотношение (28), найдем

$$\psi(E) = \frac{2N_0 E_0}{E^2} - \frac{1}{2E^2} \int_{2E}^{E_0} E' \psi(E') dE'. \quad (33)$$

Уравнение (33) описывает энергетическое распределение ПВА в интервале энергий от 0 до $E_0/2$. Запись решения в виде (33) удобна в том смысле, что позволяет последовательно определить распределение ПВА во всем энергетическом интервале. Действительно, рассмотрим интервал энергий от $E_0/4$ до $E_0/2$ и обозначим плотность столкновений в этом интервале через $\psi_2(E)$. В таком случае получим

$$\psi_2(E) = \frac{2N_0 E_0}{E^2} - \frac{1}{2E^2} \int_{2E}^{E_0} dE' E' \psi_1(E'), \quad (34)$$

где функция $\psi_1(E')$ была найдена выше, она определяется выражением (28). Подставив (28) в (34), найдем

$$\psi_2(E) = \frac{2N_0 E_0}{E^2} \left(1 - \frac{1}{2} \ln \frac{E_0}{2E}\right). \quad (35)$$

При $E = E_0/2$ имеем $\psi_1 = \psi_2$, т. е. плотность столкновений непрерывна.

Из сопоставления формул (35) и (28) вытекает, что введенное выше определение ПВА приводит к более медленному росту их функции распределения с уменьшением энергии по сравнению с решением (28), описывающим энергетическое распределение всех движущихся атомов в каскаде. Это связано с тем, что после каждого отдельного акта соударений

мы всегда отбрасываем образовавшийся атом с меньшей энергией и следим далее за атомом с большей энергией.

Определив функцию ψ_2 , можно далее определить энергетический спектр движущихся атомов ψ_3 в энергетическом интервале от $E_0/8$ до $E_0/4$, исходя из следующего уравнения:

$$\psi_3(E) = \frac{2N_0 E_0}{E^2} - \frac{1}{2E^2} \int_{E_0/2}^{E_0} dE' E' \psi_1(E') - \frac{1}{2E^2} \int_{2E}^{E_0/2} dE' E' \psi_2(E'). \quad (36)$$

Используя соотношения (28) и (35), получим

$$\psi_3(E) = \frac{2N_0 E_0}{E^2} \times \left\{1 - \frac{1}{2} \ln 2 - \frac{1}{2} \ln \frac{E_0}{4E} + \frac{1}{8} \left(\ln \frac{E_0}{4E}\right)^2\right\}. \quad (37)$$

Поступая далее аналогичным образом, можно найти энергетическое распределение ПВА при любом значении энергий.

Найденные решения (см. (28), (35), (37)) подсказывают путь к нахождению рекуррентных соотношений, позволяющих путем алгебраических вычислений определять энергетическое распределение при любом значении энергий. Определим функцию

$$\Psi_n = \frac{E_0}{2N_0} \psi_n \quad (38)$$

в энергетическом диапазоне

$$\frac{1}{2^n} \leq \frac{E}{E_0} \leq \frac{1}{2^{n-1}}. \quad (39)$$

Эту функцию будем искать в виде

$$\Psi_n = \frac{1}{y^2} \left\{ a_n + \sum_{m=1}^{n-1} b_n^{(m)} \left(\ln \frac{1}{2^{n-1}y}\right)^m \right\}, \quad (40)$$

где $y = E/E_0$, а в уравнении (31) перейдем к переменной y :

$$\frac{d\Psi}{dy} + \frac{2}{y}\Psi(y) = \frac{2}{y}\Psi(2y). \quad (41)$$

Очевидно, что это уравнение связывает функцию Ψ в двух соседних энергетических интервалах, т. е.

$$\frac{d\Psi_{n+1}}{dy} + \frac{2}{y}\Psi_{n+1}(y) = \frac{2}{y}\Psi_n(2y), \quad (42)$$

где, согласно формуле (40),

$$\Psi_{n+1} = \frac{1}{y^2} \left\{ a_{n+1} + \sum_{m=1}^n b_{n+1}^{(m)} \left(\ln \frac{1}{2ny} \right)^m \right\}. \quad (43)$$

Подставляя (43) и (40) в (42) и приравнявая члены при одинаковых степенях логарифмов, найдем

$$\begin{aligned} b_{n+1}^{(1)} &= -\frac{1}{2} a_n, \\ b_{n+1}^{(m+1)} &= -\frac{b_n^{(m)}}{2(m+1)}, \quad m = 1, 2, \dots, n-1. \end{aligned} \quad (44)$$

Сшивая далее функции (40) и (43) в точке $y = 1/2^n$, т. е. полагая, что

$$\Psi_{n+1} \left(y = \frac{1}{2^n} \right) = \Psi_n \left(y = \frac{1}{2^n} \right), \quad (45)$$

получим

$$a_{n+1} = a_n + \sum_{m=1}^{n-1} b_n^{(m)} (\ln 2)^m. \quad (46)$$

Таким образом, соотношения (44), (46) определяют связь между постоянными коэффициентами двух «соседних» функций распределения.

Проверим полученные соотношения. Поскольку $\Psi_1 = 1/y^2$,

$$a_1 = 1. \quad (47)$$

Используя далее соотношения (44) и (46), найдем

$$\begin{aligned} a_2 = 1, \quad b_2^{(1)} &= -\frac{1}{2}, \quad a_3 = 1 - \frac{1}{2} \ln 2, \\ b_3^{(1)} &= -\frac{1}{2}, \quad b_3^{(2)} = \frac{1}{8}. \end{aligned} \quad (48)$$

Подставив (48) в (40), получим

$$\begin{aligned} \Psi_2 &= \frac{1}{y^2} \left\{ 1 - \frac{1}{2} \ln \frac{1}{2y} \right\}, \\ \Psi_3 &= \frac{1}{y^2} \left\{ \left(1 - \frac{1}{2} \ln 2 \right) - \frac{1}{2} \ln \frac{1}{4y} + \frac{1}{8} \ln^2 \frac{1}{4y} \right\}. \end{aligned} \quad (49)$$

Очевидно, эти результаты совпадают с соответствующими результатами (35) и (37).

Таким образом, энергетический спектр ПВА при уменьшении энергии растет медленнее энергетического спектра, включающего движущиеся и выбитые атомы.

Рассмотрим эволюцию формирования субкаскадов атомом при его замедлении от энергии E_0 до энергии E .

Число точечных дефектов, созданных атомом с начальной энергией E_0 , равно [19]

$$n(E_0) = E_0/2\varepsilon_d. \quad (50)$$

Тогда число точечных дефектов, созданных атомом при замедлении от энергии E_0 до энергии E , имеет значение

$$n(E_0, E) = (E_0 - E)/2\varepsilon_d. \quad (51)$$

В то же время число столкновений или число субкаскадов, образованных ПВА при замедлении от энергии E_0 до энергии E , равно

$$N(E_0, E) = \frac{1}{N_0} \int_E^{E_0} \psi(E) dE. \quad (52)$$

В этом случае среднее число атомов в субкаскадах, образованных ПВА при замедлении от энергии E_0 до энергии E , будет определяться следующей величиной:

$$\langle n \rangle = n(E_0, E)/N(E_0, E). \quad (53)$$

Рассмотрим, в каком виде удобно представлять эти результаты. Перейдем при интегрировании к переменной $y = E/E_0$:

$$N(E_0, E) = \frac{1}{N_0} \int_E^{E_0} \psi(E) dE = \frac{E_0}{N_0} \int_{E/E_0}^1 \psi(y) dy. \quad (54)$$

Затем, используя функцию

$$\psi(y) = (2N_0/E_0)\Psi(y), \quad (55)$$

получим число субкаскадов, образованных одним ПВА при замедлении от энергии E_0 до энергии E :

$$N(E_0, E) = N(y) = 2 \int_{E/E_0}^1 \Psi(y) dy. \quad (56)$$

График функции $N(y)$ представлен на рис. 2.

Функцию $n(E_0, E)$ представим в виде

$$\begin{aligned} n(E_0, E) &= n \left(\frac{E_0}{2\varepsilon_d} \right) = \frac{E_0}{2\varepsilon_d} \left(1 - \frac{E}{E_0} \right) = \\ &= \nu_d \left(1 - \frac{E}{E_0} \right), \end{aligned} \quad (57)$$

где $\nu_d = E_0/2\varepsilon_d$ — полное число точечных дефектов, образованных атомом с начальной энергией E_0 или каскадная функция Кинчина–Пиза [19].

Можно получить следующую характеристику:

$$f = \langle n \rangle / \nu_d, \quad (58)$$

которая описывает развитие каскада и показывает средний процент смещенных атомов в субкаскадах, образованных ПВА при замедлении от энергии E_0

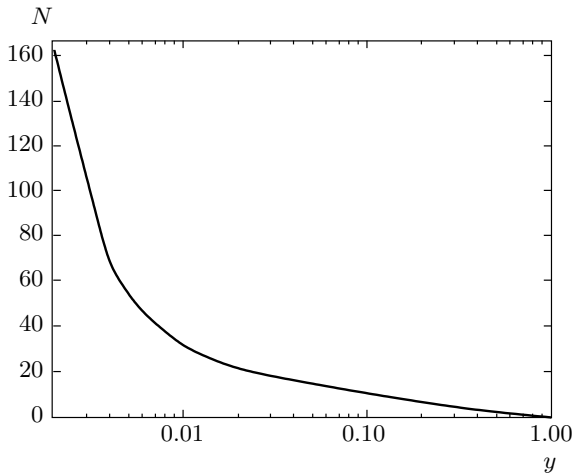


Рис. 2. Число субкаскадов $N(y)$, образованных ПВА при его замедлении от энергии E_0 до энергии E ; $y = E/E_0$

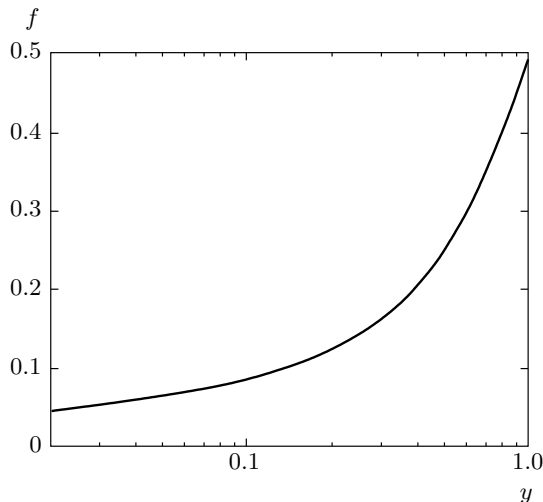


Рис. 3. Доля смещенных атомов $f(y)$ в субкаскадах по отношению к общему числу точечных дефектов, образованных ПВА при замедлении его от энергии E_0 до энергии E ; $y = E/E_0$

до энергии E , от общего числа точечных дефектов. Эта величина будет являться функцией только одной переменной E/E_0 :

$$f\left(\frac{E}{E_0}\right) = \left(1 - \frac{E}{E_0}\right) \left(2 \int_{E/E_0}^1 \Psi(y) dy\right)^{-1}. \quad (59)$$

График функции $f(E/E_0)$ изображен на рис. 3.

5. КИНЕТИЧЕСКОЕ УРАВНЕНИЕ ДЛЯ ПВА И ЗАКОНЫ СОХРАНЕНИЯ С УЧЕТОМ ЭНЕРГИИ СВЯЗИ АТОМОВ В УЗЛАХ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ РЕШЕТКИ

Кинетическое уравнение для ПВА, аналогичное уравнению (3) и описывающее энергетическое распределение ПВА с учетом энергии связи атомов (ε_d) в узлах решетки, имеет следующий вид: при $E \geq (E_0 - \varepsilon_d)/2$

$$\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial t} + \Sigma(E)\Phi(E) = & \int_E^{E_0} dE' \Phi(E') \Sigma(E' \rightarrow E) + \\ & + \eta(E_0 - E - \varepsilon_d) \times \\ & \times \int_{E+\varepsilon_d}^{E_0} dE' \Phi(E') \Sigma(E' \rightarrow E' - E - \varepsilon_d) + \\ & + N_0 \delta(E - E_0) \delta(t), \quad (60a) \end{aligned}$$

при $E \leq (E_0 - \varepsilon_d)/2$

$$\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial t} + \Sigma(E)\Phi(E) = & \int_E^{2E+\varepsilon_d} dE' \Phi(E') \Sigma(E' \rightarrow E) + \\ & + \int_{E+\varepsilon_d}^{2E+\varepsilon_d} dE' \Phi(E') \Sigma(E' \rightarrow E' - E - \varepsilon_d). \quad (60b) \end{aligned}$$

Очевидно, что это уравнение совпадает с кинетическим уравнением (3) при $\varepsilon_d = 0$.

Проанализируем законы сохранения числа частиц и энергии, вытекающие из уравнения (60). Проинтегрировав уравнение (60) по энергии от 0 до E_0 , получим уравнение (6), из которого вытекает закон сохранения для числа движущихся атомов.

Умножив далее обе части уравнения (50) на E и проинтегрировав от 0 до E_0 , в результате получим

$$\begin{aligned} \frac{dE(t)}{dt} = & - \int_0^{E_0} dE' \Sigma(E') \Phi(E; t) \Delta_d(E') + \\ & + N_0 E_0 \delta(t), \quad (61) \end{aligned}$$

где Δ_d — средние потери энергии ПВА в отдельном соударении,

$$\Delta_d(E') = \begin{cases} \int_0^{E'} dE(E' - E)P(E' \rightarrow E), & 0 < E' < \varepsilon_d, \\ \int_{(E' - \varepsilon_d)/2}^{E'} dE(E' - E)P(E' \rightarrow E) + \\ + \int_0^{(E' - \varepsilon_d)/2} dE(\varepsilon_d + E)P(E' \rightarrow E), & E' > \varepsilon_d. \end{cases} \quad (62)$$

При $\varepsilon_d = 0$ эта формула, очевидно, совпадает с формулой (9).

Интерпретация этого результата также очевидна. При $E' < \varepsilon_d$ выбитых атомов не образуется и движущийся атом только теряет энергию на упругие столкновения между атомами, которые не приводят к выбиванию атомов из узлов решетки. При $E' > \varepsilon_d$ могут появляться выбитые атомы. Если атом с энергией E' , сталкиваясь с атомом решетки, приобретает энергию E , лежащую в интервале от $(E' - \varepsilon_d)/2$ до E' , то выбитый им атом имеет меньшую энергию, и мы в дальнейшем его не рассматриваем. В таком случае потеря энергии движущегося атома есть $E' - E$, что и отражают первые слагаемые в правой части (62). Если же налетающий атом с энергией E' в результате взаимодействия перешел в состояние с энергией E , лежащей в интервале от 0 до $(E' - \varepsilon_d)/2$, то большую энергию приобрел выбитый атом, за которым мы и следим в дальнейшем. В этом случае сам атом с энергией E из рассмотрения исключается, так что потеря энергии равна величине $E + \varepsilon_d$. Это отражает второе слагаемое в формуле (62).

Формулу (62) можно получить и несколько иным способом. Мы сохраняем налетающий атом при условии, что $E > (E' - \varepsilon_d)/2$. Потеря энергии при этом равна $E' - E$. Выбитый атом мы сохраняем при том же самом условии $E > (E' - \varepsilon_d)/2$. Потеря энергии и в этом случае будет равна $E' - E$. Тогда для средней потери энергии получим

$$\Delta_d(E') = \int_{(E' - \varepsilon_d)/2}^{E'} dE(E' - E)P(E' \rightarrow E) + \\ + \int_{(E' - \varepsilon_d)/2}^{E' - \varepsilon_d} dE(E' - E)P(E' \rightarrow E' - E - \varepsilon_d). \quad (63)$$

Сделаем во втором интеграле в правой части (63) замену $y = E' - E - \varepsilon_d$, придем к выражению (62).

Теперь определим среднюю энергию, полученную выбитым атомом в отдельном соударении, $T_d(E')$. Исходя из физической трактовки, представленной выше, получим

$$T_d(E') = \int_0^{(E' - \varepsilon_d)/2} dE EP(E' \rightarrow E) + \\ + \int_{(E' - \varepsilon_d)/2}^{E' - \varepsilon_d} dE(E' - E - \varepsilon_d)P(E' \rightarrow E) \quad (64)$$

или

$$T_d(E') = \int_{(E' - \varepsilon_d)/2}^{E' - \varepsilon_d} (E' - E - \varepsilon_d)P(E' \rightarrow E) dE + \\ + \int_{(E' - \varepsilon_d)/2}^{E' - \varepsilon_d} (E' - E - \varepsilon_d)P(E' \rightarrow E' - \varepsilon_d - E) dE. \quad (65)$$

Определим разницу между потерянной и переданной энергиями при $E > \varepsilon_d$. Используя формулы (63) и (65), найдем

$$\Delta_d(E') - T_d(E') = \varepsilon_d \int_0^{E' - \varepsilon_d} P(E' \rightarrow E) dE + \\ + \int_{E' - \varepsilon_d}^{E'} (E' - E)P(E' \rightarrow E) dE. \quad (66)$$

Этот результат показывает, что разность между средней потерянной и средней приобретенной энергиями равна сумме произведения ε_d на вероятность образования выбитого атома и потери энергии без образования выбитого атома.

Определим энергетический спектр выбитых атомов, воспользовавшись формулой (65). Для этого при интегрировании перейдем к переданной энергии

$$T = E' - E - \varepsilon_d. \quad (67)$$

Проведя указанную замену, получим

$$T_d(E') = \int_0^{(E' - \varepsilon_d)/2} dT TP(E' \rightarrow E' - \varepsilon_d - T) + \\ + \int_0^{(E' - \varepsilon_d)/2} dT TP(E' \rightarrow T). \quad (68)$$

Энергетический спектр выбитых атомов имеет вид

$$S(E', T) = P(E' \rightarrow E' - \varepsilon_d - T) + P(E' \rightarrow T) \quad (69)$$

или

$$S(E', T) = \frac{1}{\Sigma(E')} \times \\ \times \{ \Sigma(E' \rightarrow E' - \varepsilon_d - T) + \Sigma(E' \rightarrow T) \}, \quad (70)$$

где величина T изменяется в следующих пределах:

$$0 \leq T \leq \frac{E' - \varepsilon_d}{2}. \quad (71)$$

Этот спектр будет нормирован на единицу, если полное сечение, входящее в формулу (70), определяется как

$$\Sigma(E') = \int_0^{E' - \varepsilon_d} dE \Sigma(E' \rightarrow E), \quad (72)$$

т. е. представляет собой сечение с передачей энергии, большей ε_d .

6. ПРИБЛИЖЕННОЕ СТАЦИОНАРНОЕ РЕШЕНИЕ КИНЕТИЧЕСКОГО УРАВНЕНИЯ ДЛЯ ПВА С УЧЕТОМ ЭНЕРГИИ СВЯЗИ АТОМОВ В УЗЛАХ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ РЕШЕТКИ

Оценим влияние учета энергии связи атомов в узлах решетки на стационарное распределение ПВА. Для этого найдем стационарное решение уравнения (60) для простого частного случая упругого, сферически симметричного рассеяния атомов в системе центра масс (см. (21)).

Следует отметить, что даже в этом случае точное стационарное решение уравнения (60) значительно сложнее, чем аналогичное решение уравнения (23), найденное выше. В связи с этим воспользуемся приближенной процедурой, изложенной в работе [20]. Будем считать, что и при учете энергии связи ($\varepsilon_d \neq 0$) энергетическое распределение ПВА описывается уравнением (3), в котором вместо сечения $\Sigma(E)$ будем использовать величину $\Sigma_{eff}(E)$. При такой замене закон сохранения числа частиц будет выполняться автоматически. Энергетическую зависимость сечения $\Sigma_{eff}(E)$ найдем, потребовав, чтобы уравнения (3) (где теперь используется Σ_{eff}) и (60) приводили к одним и тем же законам сохранения энергии. Сопоставив (7) и (61), найдем

$$\Sigma_{eff}(E) = \Sigma(E) \frac{\Delta_d(E)}{\Delta_0(E)}. \quad (73)$$

Подставив (21) в (9) и (62), получим (при $E > \varepsilon_d$)

$$\Delta_0(E) = \frac{1}{4} E, \\ \Delta_d(E) = \frac{1}{2E} \left\{ E^2 - \frac{(E - \varepsilon_d)^2}{2} \right\} = \\ = \frac{E}{4} \left\{ 1 + 2 \frac{\varepsilon_d}{E} - \left(\frac{\varepsilon_d}{E} \right)^2 \right\}. \quad (74)$$

В этом случае (см. (73))

$$\Sigma_{eff}(E) = \left\{ 1 + 2 \frac{\varepsilon_d}{E} - \left(\frac{\varepsilon_d}{E} \right)^2 \right\} \Sigma(E). \quad (75)$$

Из сказанного следует, что при учете энергии связи энергетическое распределение ПВА будет описываться решением, полученным выше (см. (40)), в котором следует заменить сечение рассеяния $\Sigma(E)$ на $\Sigma_{eff}(E)$ (см. (75)). Очевидно, что отличие полученного таким образом решения будет существенно только при энергиях, близких к ε_d , а при $E \gg \varepsilon_d$ эти решения совпадают.

7. ОПРЕДЕЛЕНИЕ ГРАНИЧНОЙ ЭНЕРГИИ ОБРАЗОВАНИЯ СУБКАСКАДОВ, ИХ РАЗМЕРОВ И ЧИСЛА

Одним из основных параметров, необходимых для анализа образования радиационных дефектов, является определение минимальной энергии замедляющегося атома (E_{sf}), начиная с которой происходит образование субкаскадов атомных столкновений. Для ее определения проводится сопоставление длины свободного пробега ПВА ($\lambda(E)$) со средним размером зоны повреждений, образованной выбитым атомом ($R_{sub}(E)$) (см. [5, 6, 18]). За граничное значение энергии образования субкаскадов (E_{sf}) принимается величина, начиная с которой длина свободного пробега ($\lambda(E)$) будет превосходить размер зоны повреждений ($R_{sub}(E)$), т. е.

$$\lambda(E_{sf}) = R_{sub}(E_{sf}). \quad (76)$$

Величина пробега выбитого атома с энергией T определяется следующим выражением:

$$R(T) = \int_0^T \frac{dE}{dE/dx}, \quad (77)$$

где $dE/dx = \Sigma(E)\Delta_d(E)$ — потери энергии выбитым атомом на единицу длины (см. (62)).

Для определения среднего размера зоны повреждений, образуемой при соударении ПВА с энергией E с атомом в узле решетки, необходимо величину,

определяемую формулой (77), усреднить по спектру выбитых атомов (69), (70):

$$R_{sub}(E) = \int_0^{(E-\varepsilon_d)/2} R(T)S(E, T) dT. \quad (78)$$

Используя формулы (76)–(78) для определения граничной энергии образования субкаскадов, получим следующее выражение:

$$\int_0^{(E_{sf}-\varepsilon_d)/2} R(T) [\Sigma(E_{sf} \rightarrow E_{sf} - \varepsilon_d - T) + \Sigma(E_{sf} \rightarrow T)] dT = 1. \quad (79)$$

Таким образом, при энергиях, больших E_{sf} , при соударениях ПВА будут образовываться субкаскады. Их размер определяется величиной (78), а их количество — числом соударений ПВА в области энергий от E_{sf} до E_0 .

При проведении расчетов по формуле (79) для дифференциального сечения упругого рассеяния будем использовать следующее аналитическое выражение, полученное для потенциала межатомного взаимодействия Томаса – Ферми [21]:

$$\Sigma(E \rightarrow E') = N_a \frac{\pi a^2}{2} \frac{dt}{t^{3/2}} \frac{pt^{1/2-m}}{[1 + (2pt^{1-m})q]^{1/q}}, \quad (80)$$

где

$$t = \frac{E(E - E')}{\varepsilon_0^2}, \quad \varepsilon_0 = \frac{2\sqrt{2}e^2 Z^{7/3}}{0.885a},$$

$a = 0.53 \cdot 10^{-8}$ см, e — заряд электрона, Ze — заряд атомного ядра, N_a — число атомов мишени в единице объема, p, m, q — свободные параметры (здесь соответственно равны 1.309, 1/3, 2/3).

Поскольку $E_{sf} \gg \varepsilon_d$, в формуле (79) при расчетах будем полагать $\varepsilon_d = 0$. Используя соотношения (80) и (77), легко убедиться, что в уравнение (79) искомое значение энергии входит в виде безразмерной величины E_{sf}/ε_0 . Его численное решение (см. рис. 4) приводит к следующему результату:

$$E_{sf} \approx 2.5\varepsilon_0. \quad (81)$$

Поскольку в выражение для ε_0 кроме порядкового номера элемента Z входят только фундаментальные постоянные, для конкретного металла выражение (81) для пороговой энергии образования субкаскадов удобно представить в виде

$$E_{sf} [\text{кэВ}] = 0.218Z^{7/3}. \quad (82)$$

Оценки по формуле (82) для алюминия ($Z = 13$), железа ($Z = 26$), меди ($Z = 29$) приводят соответственно к следующим результатам: 87, 437, 563 кэВ.

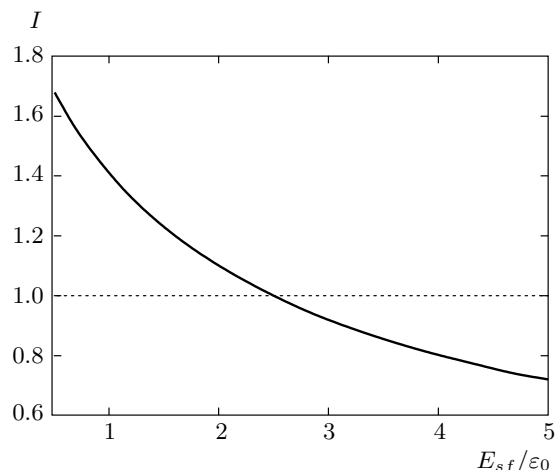


Рис. 4. Графическое решение уравнения (79) для определения пороговой энергии образования субкаскадов E_{sf} при $\varepsilon_d = 0$; I — интеграл, стоящий в левой части уравнения (79). Величина E_{sf} определяется из соотношения $I = 1$

8. ВЫВОДЫ

На основе использования линейного кинетического уравнения Больцмана для движущихся атомов проведен теоретический анализ процесса образования субкаскадов атомных столкновений и их структуры в твердых телах, состоящих из атомов одного сорта. Для этого использован подход, предложенный в работах [5, 6, 18], где предлагается рассматривать движущийся атом, который в каждом отдельном соударении получает большую энергию, как ПВА. Атом, получивший меньшую кинетическую энергию в упругом столкновении, рассматривается как выбитый атом в твердом теле. Именно вдоль траекторий таких ПВА образуются субкаскады (неперекрывающиеся области образования смещенных атомов, вырванных из узлов решетки в результате упругих столкновений (радиационных точечных дефектов)).

Для определенных таким образом ПВА получено кинетическое уравнение, описывающее их замедление. На основе законов сохранения, вытекающих из этого уравнения, найдены средние потери энергии ПВА в отдельном соударении, а также энергетический спектр атомов, выбитых в отдельном соударении атомов.

Найдено стационарное аналитическое решение полученного кинетического уравнения. Это решение, с одной стороны, дает возможность учесть особенности энергетического распределения ПВА, а с

другой, может являться тестом, используемым в дальнейшем при решении кинетического уравнения, позволяющего определить пространственное распределение ПВА.

С помощью полученных на основе законов сохранения среднего сброса энергии ПВА и энергетического спектра выбитых атомов был представлен в аналитическом виде простой критерий для определения нижней энергетической границы ПВА, начиная с которой образуются субкаскады (пороговой энергии для образования субкаскадов). В результате теоретических расчетов получены аналитические соотношения для определения средних размеров субкаскадов и их числа.

Для парного межатомного потенциала взаимодействия Томаса–Ферми найдена пороговая энергия образования субкаскадов в облучаемых твердых телах, состоящих из одинаковых атомов. Показано, что в этом случае пороговая энергия зависит лишь от порядкового номера атомов, образующих облучаемое твердое тело.

ЛИТЕРАТУРА

1. M. T. Robinson and I. M. Torrens, Phys. Rev. B **9**, 5008 (1972).
2. H. L. Heinisch, J. Nucl. Mat. **117**, 47 (1983); **103**, 1325 (1981).
3. H. L. Heinisch and B. N. Singh, Phil. Mag. A **67**, 407 (1993).
4. H. L. Heinisch and B. N. Singh, J. Nucl. Mat. **251**, 77 (1997).
5. Y. Satoh, S. Kojima, T. Yoshiie, and M. Kiritani, J. Nucl. Mat. **179–181**, 901 (1991).
6. Y. Satoh, T. Yoshiie, and M. Kiritani, J. Nucl. Mat. **191–194**, 1101 (1992).
7. Y. Yamamura, J. Nucl. Mat. **179–181**, 94 (1991).
8. T. Diaz de la Rubia and M. W. Guinan, Phys. Rev. Lett. **66**, 2766 (1991).
9. T. Diaz de la Rubia and M. W. Guinan, Mater. Sci. Forum **97–99**, 23 (1992).
10. W. J. Phythian, R. E. Stoller, A. J. E. Foreman, A. F. Calder, and D. J. Bacon, J. Nucl. Mat. **223**, 245 (1995).
11. R. E. Stoller, Mat. Res. Soc. Symp. Proc. **373**, 21 (1995).
12. R. E. Stoller, Proc. ICFRM-8, J. Nucl. Mat. **555**, 10 (1998).
13. N. Soneda and T. Diaz de la Rubia, Phil. Mag. A **78**, 995 (1998).
14. Ю. Д. Лизунов, А. И. Рязанов, ЖТФ **LI**, 170 (1981).
15. Yu. D. Lizunov and A. I. Ryazanov, Rad. Effects **60**, 95 (1982).
16. Yu. D. Lizunov and A. I. Ryazanov, Поверхность **5**, 121 (1987).
17. А. И. Исаков, М. В. Казарновский, Ю. А. Медведев, Е. В. Метелкин, *Стационарное замедление нейтронов. Основные закономерности и некоторые приложения*, Наука, Москва (1984).
18. Е. В. Метелкин, А. И. Рязанов, Атомная энергия **83**, 183 (1997).
19. M. T. Robinson, J. Nucl. Mat. **216**, 1 (1994).
20. A. I. Ryazanov and E. V. Metelkin, Rad. Effects **52**, 15 (1980).
21. K. B. Winterbon, Rad. Effects **13**, 215 (1972).