

# ИСПОЛЬЗОВАНИЕ МОДЕЛЬНОГО УРАВНЕНИЯ БОЛЬЦМАНА ДЛЯ АНАЛИЗА ВЛИЯНИЯ ЭНЕРГИИ СВЯЗИ НА РАЗВИТИЕ КАСКАДА ВЫБИТЫХ АТОМОВ В ТВЕРДОМ ТЕЛЕ

*Е. В. Метелкин\**, *М. В. Лебедева*

*Российский химико-технологический университет им. Д. И. Менделеева  
124047, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 9 апреля 2021 г.,  
после переработки 9 апреля 2021 г.  
Принята к публикации 15 апреля 2021 г.

Рассматривается развитие каскада атомных столкновений в твердом теле, состоящем из одинаковых атомов с учетом их энергии связи в узлах решетки ( $\varepsilon_d$ ). На основе решения модельного кинетического уравнения Больцмана получено выражение для функции распределения, описывающей нестационарное энергетическое распределение движущихся атомов. Предполагается, что рассеяние движущихся атомов является упругим и сферически-симметричным в системе центра инерции, а сечение взаимодействия является постоянной величиной. В частном случае  $\varepsilon_d = 0$  найденное решение хорошо согласуется с точным решением, полученным ранее.

DOI: 10.31857/S0044451021080022

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Проектирование и создание ядерных реакторов и термоядерных установок тесно связано с проблемой выбора для них радиационно-стойких материалов, поскольку их корпуса и отдельные элементы должны выдерживать продолжительное воздействие радиации. Именно радиационная стойкость материала во многом определяет время жизни установок и многие другие их физические характеристики.

Облучение твердых тел быстрыми частицами (в частности, нейтронами) приводит к тому, что атомы кристаллической решетки, получившие от налетающей частицы энергию, большую энергии связи ( $\varepsilon_d$ ), вылетают из своих равновесных положений. В дальнейшем столкновения движущихся атомов с атомами, находящимися в узлах кристаллической решетки, приводят к появлению новых поколений выбитых атомов. В результате возникает так называемый каскад атомных столкновений. В результате развития каскада в твердом теле образуется целый комплекс дефектов (вакансии и междоузельные атомы, кластеры и т. д.), определяющий степень повреждения материала и его дальнейшие физические свой-

ства [1–5]. В связи с этим исследование энергетического распределения каскада атомных столкновений и его развития во времени представляет большой интерес.

Описание развития каскадов представляет собой достаточно сложную задачу. В связи с этим для ее решения с успехом используется компьютерное моделирование [2, 6, 7]. Однако аналитические решения соответствующей задачи для линейного уравнения Больцмана, несмотря на то, что они существуют в исключительных случаях, также представляют значительный интерес. Это связано с тем, что аналитические решения дают наглядное представление о протекающем процессе и его особенностях. Кроме того, эти результаты могут быть использованы для тестирования достаточно сложных численных расчетов.

Исследованию развития каскадов атомных столкновений в твердом теле было посвящено достаточно большое количество работ [8–20]. В работе [8] с помощью построенной модельной индикатрисы рассеяния было получено приближенное стационарное энергетическое распределение каскада движущихся атомов для произвольных потенциалов межатомного взаимодействия. В работах [9, 10] анализировалась возможность образования субкаскадов — ряда неперекрывающихся меж-

\* E-mail: sitech47@mail.ru

ду собой областей в процессе развития каскада атомных столкновений. Оценка пороговой энергии образования субкаскадов была проведена в работе [11]. В работе [12] была разработана теоретическая модель для исследования образования каскадов и субкаскадов атомных столкновений в облучаемых твердых телах, основанная на использовании линейного кинетического уравнения Больцмана. На основе расширенного толкования понятия первично выбитый атом (ПВА) в [12] был сформулирован критерий для определения пороговой энергии образования субкаскадов в твердом теле и получены формулы для определения средних размеров и их числа в зависимости от энергии ПВА. На основе результатов, представленных в [12], в работе [13] были проведены численные расчеты для конкретных материалов, согласующиеся с экспериментальными данными.

В работе [14] на основе решения кинетического уравнения Больцмана была рассчитана функция распределения по энергиям, описывающая стационарное энергетическое распределение каскада движущихся атомов при степенном потенциале взаимодействия ( $U \sim 1/r^n$  [15]) с учетом энергии связи атомов в узлах решетки. Кроме того, на основе представлений, развитых в [12], в работе [16] были определены пространственные и временные характеристики первично выбитых релятивистских электронов, замедляющихся в веществе за счет ионизационных потерь. В работе [17] эти представления были использованы для вычисления стационарного энергетического распределения релятивистских электронов, замедляющихся в веществе за счет ионизационных потерь с учетом их размножения.

В работах [18, 19] было получено точное решение кинетического уравнения Больцмана, описывающее нестационарное энергетическое распределение каскада движущихся атомов с учетом их размножения. Предполагалось, что материал состоит из одинаковых атомов, рассеяние движущихся атомов является упругим и сферически-симметричным в системе центра инерции, а энергия связи атомов в узлах решетки не учитывалась ( $\varepsilon_d = 0$ ). В [18] предполагалось, что сечение рассеяния является постоянной величиной ( $\Sigma = \text{const}$ ), а в [19] оно полагалось обратно пропорциональным скорости ( $\Sigma = \Sigma_0/v$ ;  $\Sigma_0 = \text{const}$ ). В работе [20] в тех же предположениях ( $\varepsilon_d = 0$ ;  $\Sigma = \text{const}$ ) с использованием  $P_1$  и транспортного приближений было получено нестационарное пространственно-энергетическое распределение каскада выбитых атомов.

В настоящей работе на основе решения модельного кинетического уравнения Больцмана определяется нестационарное пространственно-энергетическое распределение каскада движущихся атомов с учетом их энергии связи в узлах решетки. Предполагается, что рассеяние движущихся атомов является упругим и сферически-симметричным в системе центра инерции, а сечение рассеяния считается постоянным. Полученное решение при  $\varepsilon_d = 0$  хорошо согласуется с точным решением аналогичной задачи (см. [18]).

## 2. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Рассмотрим распространение каскада выбитых атомов в твердом теле, состоящем из одинаковых атомов. Кинетическое уравнение Больцмана, описывающее этот процесс, имеет следующий вид [12, 21]:

$$\begin{aligned} \frac{1}{v} \frac{\partial \Phi(E, t)}{\partial t} + \Sigma(E) \Phi(E, t) = \\ = \int_E^{E_0} dE' P(E' \rightarrow E) \Sigma(E') \Phi(E', t) + \\ + \int_{E+\varepsilon_d}^{E_0} dE' P(E' \rightarrow E' - E - \varepsilon_d) \times \\ \times \Sigma(E') \Phi(E', t) + N_0 \delta(E - E_0) \delta(t), \quad (1) \end{aligned}$$

где  $f(E, t)dE$  — число атомов с энергией  $E$  в интервале  $dE$  в момент времени  $t$  в единице объема;  $\Phi(E, t) = vf(E, t)$  — поток движущихся атомов;  $v$  — их скорость;

$$P(E' \rightarrow E) = \Sigma(E' \rightarrow E)/\Sigma(E')$$

— индикатриса рассеяния (вероятность того, что движущийся атом с энергией  $E'$  в результате рассеяния перейдет в единичный интервал энергий вблизи значения  $E$ );  $\Sigma(E' \rightarrow E)$  и  $\Sigma(E')$  — дифференциальное и полное макроскопические сечения рассеяния атомов;  $\delta(x)$  — дельта-функция Дирака;  $E_0$  — начальная энергия движущихся атомов;  $N_0$  — их полное число, испущенное в единицу объема;  $\varepsilon_d$  — энергия связи атомов в узлах решетки.

Первый интеграл, стоящий в правой части кинетического уравнения (1), описывает переход движущегося атома с энергией  $E'$  в состояние с энергией  $E$ . Вторым интегралом описывается образование выбитого атома с энергией  $E$ , когда движущийся атом перешел в состояние с энергией  $(E' - E - \varepsilon_d)$ .

Точное решение уравнения (1), как отмечалось выше, было получено в работах [18, 19] для упругого, сферически-симметричного рассеяния в системе центра масс без учета энергии связи атомов в узлах решетки ( $\varepsilon_d = 0$ ).

Из уравнения (1) вытекают следующие законы сохранения полного числа частиц и энергии:

$$\frac{dN}{dt} = \int_{\varepsilon_d}^{E_0} dE p(E) \Sigma(E) \Phi(E, t), \quad (2)$$

$$\frac{dE(t)}{dt} = - \int_0^{E_0} dE \Delta_0(E) \Sigma(E) \Phi(E, t), \quad (3)$$

где

$$N(t) = \int_0^{E_0} dE f(E, t), \quad (4)$$

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

$$p(E) = \int_0^{E-\varepsilon_d} P(E \rightarrow E') dE', \quad (5)$$

а функция  $\Delta_0(E)$  определяется следующими выражениями:

$$\Delta_0(E) = \Delta(E) = \int_0^E dE' (E - E') P(E \rightarrow E') \quad (6)$$

при  $E \leq \varepsilon_d$ ,

$$\Delta_0 = p(E) \varepsilon_d + \int_{E-\varepsilon_d}^E dE' (E - E') P(E \rightarrow E') \quad (7)$$

при  $E \geq \varepsilon_d$ .

Величина  $p(E)$  представляет собой вероятность того, что движущийся атом с энергией  $E$  передает атому решетки энергию, большую  $\varepsilon_d$ . Очевидно, что при  $E \leq \varepsilon_d$  величина  $p(E)$  обращается в нуль.

Из соотношений (3), (6), (7) вытекает, что потери энергии движущимися атомами происходят таким образом, что при  $E \leq \varepsilon_d$  движущийся атом не может выбить атом из узла решетки. В одном таком соударении движущийся атом теряет в среднем количество энергии  $\Delta(E)$ . При  $E \geq \varepsilon_d$  потери энергии

обусловлены тем, что часть энергии ( $p(E) \varepsilon_d$ ) движущийся атом тратит на выбивание атома из узла решетки, а часть энергии теряет в столкновениях с передачей энергии покоящемуся атому меньшей  $\varepsilon_d$  (второе слагаемое в (7)), не выбивая его из узла решетки.

Упростим уравнение (1), представив его в следующем виде [8]:

$$\begin{aligned} \frac{1}{v} \frac{\partial \Phi(E, t)}{\partial t} + [\Sigma(E) + \delta \Sigma_1(E)] \Phi(E, t) = \\ = \int_E^{E_0} [\Sigma(E') + \delta \Sigma_1(E')] P(E' \rightarrow E) \Phi(E', t) dE' + \\ + \int_E^{E_0} [\Sigma(E') + \delta \Sigma_2(E')] P(E' \rightarrow E' - E) \times \\ \times \Phi(E', t) dE' + N_0 \delta(E - E_0) \delta(t). \quad (8) \end{aligned}$$

Выражения для  $\delta \Sigma_1(E)$  и  $\delta \Sigma_2(E)$  получим, потребовав, чтобы из уравнения (8) вытекали те же законы сохранения (2), (3), что и из исходного уравнения (1). Проинтегрировав уравнение (8) (см. (4)), найдем

$$\delta \Sigma_1(E) = \Sigma(E) \left( \frac{\Delta_0(E)}{\Delta(E)} + p(E) - 1 \right), \quad (9)$$

$$\delta \Sigma_2(E) = -\Sigma(E) (1 - p(E)). \quad (10)$$

При  $E$ , стремящемся к  $\varepsilon_d$ , функции  $\delta \Sigma_1(E)$  и  $\delta \Sigma_2(E)$  принимают значения соответственно 0 и  $-\Sigma(E)$ , в уравнении (8) второй интеграл обращается в нуль, и оно переходит в обычное уравнение замедления.

Далее будем считать, что рассеяние движущихся атомов на покоящихся является сферически-симметричным в системе центра инерции и описывается индикатрисой рассеяния, имеющей следующий вид [21]:

$$P(E' \rightarrow E) = \frac{1}{E'}. \quad (11)$$

В таком случае при  $E \geq \varepsilon_d$  уравнение (8) принимает следующий вид (5)–(7), (9), (10):

$$\begin{aligned} \frac{1}{v \Sigma(E)} \frac{\partial \Psi(E, t)}{\partial t} + \left[ 1 + \frac{\varepsilon_d}{E} - \left( \frac{\varepsilon_d}{E} \right)^2 \right] \Psi(E, t) = \\ = \int_E^{E_0} \frac{dE'}{E'} \left[ 2 - \left( \frac{\varepsilon_d}{E'} \right)^2 \right] \Psi(E', t) + \\ + N_0 \delta(t) \delta(E - E_0), \quad (12) \end{aligned}$$

где  $\Psi(E, t) = \Sigma(E)\Phi(E, t)$  — плотность соударений.

При  $E = \varepsilon_d$  уравнение (12) переходит в обычное уравнение замедления.

Следует отметить, что в работе [22] был проведен менее точный учет влияния энергии связи на развитие каскада, являющийся частным случаем представленного выше подхода. В [22] полагалось, что потери энергии происходят только за счет вырывания атомов из узла решетки:

$$\frac{d}{dt}E(t) = -\varepsilon_d \frac{d}{dt}N(t). \quad (13)$$

Между (2) и (3) будет существовать связь в виде (13), если положить в них  $p = 1$  и  $\Delta_0 = \varepsilon_d$ . Таким образом, в [22] не учитывались соударения, сопровождающиеся передачей энергии, меньшей  $\varepsilon_d$ , что привело к завышенному значению каскадной функции (см. ниже).

### 3. РЕШЕНИЕ КИНЕТИЧЕСКОГО УРАВНЕНИЯ

Рассмотрим решение уравнения (12). Применяя к обеим частям уравнения преобразование Лапласа по времени [23]

$$\tilde{\Psi}(E, p) = \int_0^\infty \exp(-st)\Psi(E, t) dt \quad (14)$$

получим

$$\begin{aligned} & \left[ \frac{s}{v\Sigma} + 1 + \frac{\varepsilon_d}{E} - \left( \frac{\varepsilon_d}{E} \right)^2 \right] \tilde{\Psi}(E, s) = \\ & = \int_E^{E_0} \frac{dE'}{E'} \left[ 2 - \left( \frac{\varepsilon_d}{E'} \right)^2 \right] \tilde{\Psi}(E', s) + N_0 \delta(E - E_0). \end{aligned} \quad (15)$$

Выделим в решении уравнения (15) нерассеянное излучение

$$\begin{aligned} \tilde{\Psi}(E, s) = & \tilde{\Psi}_0(E, s) + \\ & + \frac{N_0 \delta(E - E_0)}{\left[ s/v\Sigma + 1 + \varepsilon_d/E - (\varepsilon_d/E)^2 \right]}. \end{aligned} \quad (16)$$

В таком случае для определения функции  $\tilde{\Psi}_0(E, p)$  (рассеянное излучение) получим следующее уравнение:

$$\begin{aligned} & \left[ \frac{s}{v\Sigma} + 1 + \frac{\varepsilon_d}{E} - \left( \frac{\varepsilon_d}{E} \right)^2 \right] \tilde{\Psi}_0(E, s) = \\ & = \int_E^{E_0} \frac{dE'}{E'} \left[ 2 - \left( \frac{\varepsilon_d}{E'} \right)^2 \right] \tilde{\Psi}_0(E', s) + \\ & + \frac{N_0 \left[ 2 - (\varepsilon_d/E_0)^2 \right]}{E_0 \left[ s/v_0\Sigma(E_0) + 1 + \varepsilon_d/E_0 - (\varepsilon_d/E_0)^2 \right]}. \end{aligned} \quad (17)$$

Далее будем полагать, что сечение рассеяния постоянно ( $\Sigma = \text{const}$ ). С учетом этого обстоятельства, дифференцируя (17) по энергии, найдем уравнение для определения функции  $\tilde{\Psi}_0(E, p)$ :

$$\frac{d\tilde{\Psi}_0}{\tilde{\Psi}_0} = -\frac{dE}{E} \frac{\left[ 2 - s/2v\Sigma - \varepsilon_d/E + (\varepsilon_d/E)^2 \right]}{\left[ 1 + s/v\Sigma + \varepsilon_d/E - (\varepsilon_d/E)^2 \right]}. \quad (18)$$

Граничное условие для (18) легко получить из (17):

$$\begin{aligned} \tilde{\Psi}_0(E_0, s) = & \\ = & \frac{N_0 \left[ 2 - (\varepsilon_d/E_0)^2 \right]}{E_0 \left[ s/v_0\Sigma + 1 + \varepsilon_d/E_0 - (\varepsilon_d/E_0)^2 \right]^2}. \end{aligned} \quad (19)$$

В таком случае решение уравнения (18) легко определить:

$$\begin{aligned} \tilde{\Psi}_0(E, s) = & \frac{N_0 \left[ 2 - (\varepsilon_d/E_0)^2 \right]}{E_0 \left[ s/v_0\Sigma + 1 + \varepsilon_d/E_0 - (\varepsilon_d/E_0)^2 \right]^2} \times \\ & \times \exp \left\{ \int_E^{E_0} \frac{dE'}{E'} \frac{\left[ 2 - s/2v\Sigma - \varepsilon_d/E' + (\varepsilon_d/E')^2 \right]}{\left[ 1 + s/v\Sigma + \varepsilon_d/E' - (\varepsilon_d/E')^2 \right]} \right\}. \end{aligned} \quad (20)$$

Вычисление оригинала по формуле (20) является достаточно сложной задачей. В связи с этим функцию распределения  $\Psi_0(E, t)$  (рассеянное излучение) будем искать в следующем виде:

$$\Psi_0(E, t) = A(E)t^{b(E)} \exp[-c(E)t], \quad (21)$$

где параметры  $A(E)$ ,  $b(E)$ ,  $c(E)$  легко определяются через временные моменты (см., например, [21])

$$\begin{aligned} \langle t^n(E) \rangle = & \int_0^\infty dt t^n \Psi_0(E, t) / \\ & / \int_0^\infty dt \Psi_0(E, t) \quad (n = 1, 2, \dots) \end{aligned} \quad (22)$$

от функции распределения (20), являющейся точным решением уравнения (15).

Используя (21), (22), найдем

$$\begin{aligned}
 A(E) &= \frac{\tilde{\Psi}_0(E, s=0)c(E)^{b(E)+1}}{\Gamma[b(E)+1]}, \\
 b(E) &= \frac{\langle t(E) \rangle^2}{\langle t^2(E) \rangle - \langle t(E) \rangle^2} - 1, \\
 c(E) &= \frac{\langle t(E) \rangle}{\langle t^2(E) \rangle - \langle t(E) \rangle^2},
 \end{aligned} \tag{23}$$

где  $\Gamma(x)$  — гамма-функция [24].

Соответствующие временные моменты можно найти с помощью (20) следующим образом:

$$\begin{aligned}
 \langle t^n(E) \rangle &= \\
 &= (-1)^n \left\{ \left[ \frac{\partial^n}{\partial s^n} \tilde{\Psi}_0(E, s) \right] / \tilde{\Psi}_0(E, s) \right\}_{s=0}.
 \end{aligned} \tag{24}$$

Используя (20), (24), получим

$$\begin{aligned}
 \tilde{\Psi}_0(E, s=0) &= \frac{N_0}{E_0} \frac{(2E_0^2 - \varepsilon_d^2)}{E_0^2 + E_0\varepsilon_d - \varepsilon_d^2} \times \\
 &\times \frac{E}{E_0} \left( \frac{E_0^2 + E_0\varepsilon_d - \varepsilon_d^2}{E^2 + E\varepsilon_d - \varepsilon_d^2} \right)^{3/2} \times \\
 &\times \left[ \frac{2E_0 + \varepsilon_d(1 + \sqrt{5})}{2E_0 + \varepsilon_d(1 - \sqrt{5})} \right]^{3/2\sqrt{5}} \times \\
 &\times \left[ \frac{2E + \varepsilon_d(1 - \sqrt{5})}{2E + \varepsilon_d(1 + \sqrt{5})} \right]^{3/2\sqrt{5}},
 \end{aligned} \tag{25}$$

$$\begin{aligned}
 \langle t(E) \rangle v_0 \Sigma &= \frac{2E_0^2}{E_0^2 + E_0\varepsilon_d - \varepsilon_d^2} + \\
 &+ \frac{1}{2} \int_E^{E_0} dE \sqrt{EE_0} \frac{5E^2 - E\varepsilon_d + \varepsilon_d^2}{(E^2 + E\varepsilon_d - \varepsilon_d^2)^2},
 \end{aligned} \tag{26}$$

$$\begin{aligned}
 \langle t^2(E) \rangle v_0^2 \Sigma^2 &= \frac{6E_0^2}{E_0^2 + E_0\varepsilon_d - \varepsilon_d^2} + \frac{2E_0^2}{E_0^2 + E_0\varepsilon_d - \varepsilon_d^2} \times \\
 &\times \int_E^{E_0} dE \sqrt{EE_0} \frac{5E^2 - E\varepsilon_d + \varepsilon_d^2}{(E^2 + E\varepsilon_d - \varepsilon_d^2)^2} + \\
 &+ \frac{1}{4} \left[ \int_E^{E_0} dE \sqrt{EE_0} \frac{5E^2 - E\varepsilon_d + \varepsilon_d^2}{(E^2 + E\varepsilon_d - \varepsilon_d^2)^2} \right]^2 + \\
 &+ \int_E^{E_0} dE E_0 E^2 \frac{5E^2 - E\varepsilon_d + \varepsilon_d^2}{(E^2 + E\varepsilon_d - \varepsilon_d^2)^3}.
 \end{aligned} \tag{27}$$

Таким образом, окончательно функцию распределения  $f_0(E, t)$  (рассеянное излучение) можно представить в следующем безразмерном виде:

$$\begin{aligned}
 f'(E, \tau) &= \frac{f_0(E, t) E_0}{N_0} = \\
 &= f'_0(E) \frac{[c'(E)]^{b(E)+1}}{\Gamma[b(E)+1]} \tau^b \exp[-c'(E)\tau],
 \end{aligned} \tag{28}$$

где  $\tau = v_0 \Sigma t$ ,  $c'(E) = c(E)/(v_0 \Sigma)$ ,  $f'_0(E) = \tilde{\Psi}_0(E, s=0) E_0 / (N_0 v_0 \Sigma)$  (см. (25)).

#### 4. АНАЛИЗ ПОЛУЧЕННОГО РЕШЕНИЯ

Положив в (20)  $\varepsilon_d = 0$  и проведя интегрирование, получим точное решение соответствующей задачи без учета энергии связи (см. в [18] формулу (10)).

Оценим точность использования в качестве решения уравнения (15) функции распределения в виде (21). На рис. 1 представлены зависимости функции распределения от времени, построенные для различных значений энергии по формуле (28) без учета энергии связи ( $\varepsilon_d = 0$ ) и являющиеся точным решением соответствующей задачи (см. (12) в [18]). На рисунке видно, что функция (28) при  $\varepsilon_d = 0$  с

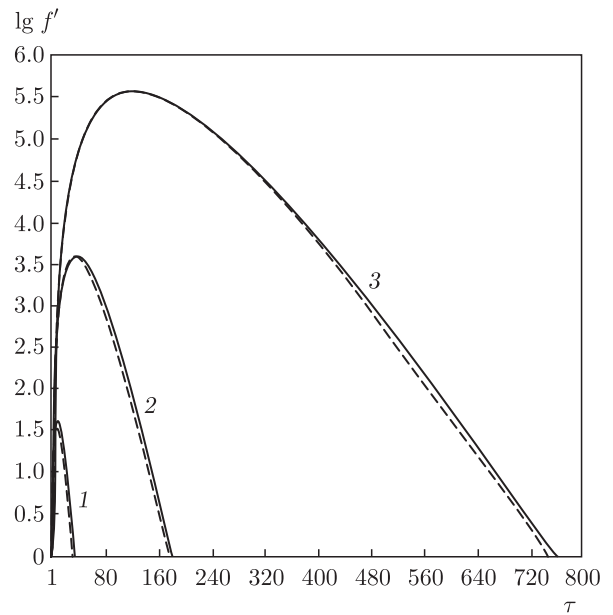
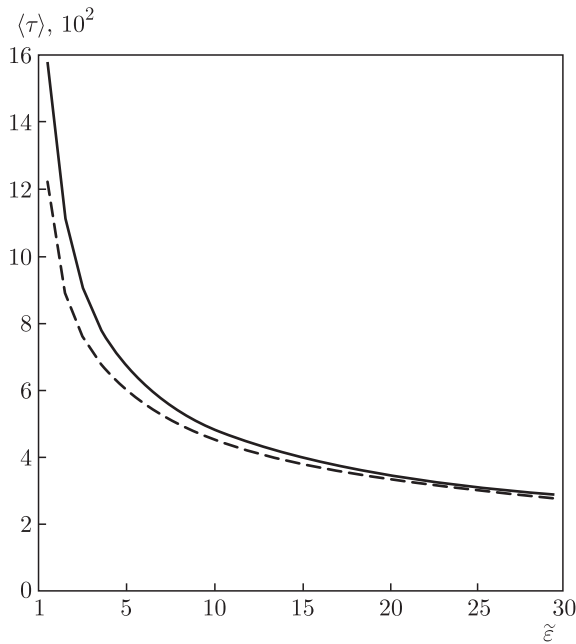
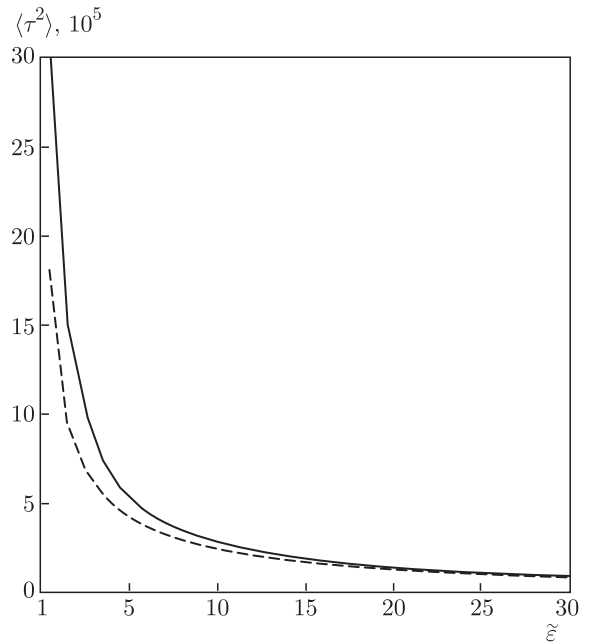


Рис. 1. Зависимость функции распределения  $f'(\tau)$  от безразмерного времени  $\tau$ , построенная по формуле (28) при  $\varepsilon_d = 0$  (сплошные кривые) и по формуле (12) из [18] (штриховые кривые) для различных значений безразмерной энергии  $\varepsilon = E/E_0$ : 1 —  $\varepsilon = 10^{-1}$ , 2 —  $\varepsilon = 10^{-2}$ , 3 —  $\varepsilon = 10^{-3}$



**Рис. 2.** Зависимости среднего времени замедления ( $\langle \tau \rangle = \Sigma v_0 \langle t \rangle$ ) от безразмерной энергии  $\tilde{\epsilon} = E/\epsilon_d$  (штриховая кривая — с учетом энергии связи; сплошная кривая — при  $\epsilon_d = 0$ ), построенные по формуле (26)



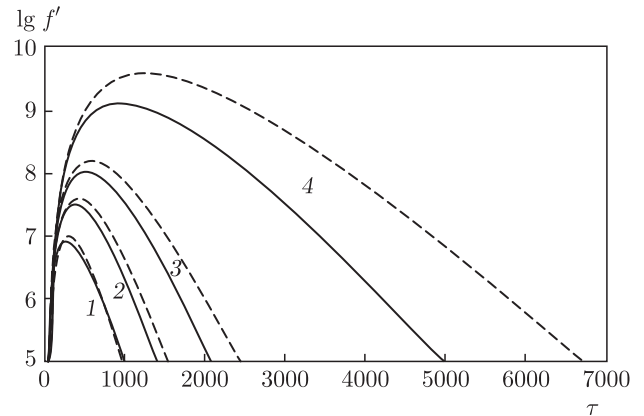
**Рис. 3.** Зависимости среднего квадрата времени замедления ( $\langle \tau^2 \rangle = \Sigma^2 v_0^2 \langle t^2 \rangle$ ) от безразмерной энергии  $\tilde{\epsilon} = E/\epsilon_d$  (штриховая кривая — с учетом энергии связи; сплошная кривая — при  $\epsilon_d = 0$ ), построенные по формуле (27)

хорошей точностью описывает точное решение соответствующей задачи из [18].

Из рис. 2 и 3 следует, что учет энергии связи приводит к уменьшению среднего времени замедления и квадрата этой величины (при расчетах полагалось, что  $E_0/\epsilon_d = 10^5$ ). Отмеченное обстоятельство очевидно обусловлено тем, что при учете энергии связи учитываются потери энергии на выбивание атомов из узлов решетки.

На рис. 4 представлена зависимость функции распределения от времени, построенная по формуле (28) для различных значений энергии как с учетом, так и без учета энергии связи (полагалось, что  $E_0/\epsilon_d = 10^5$ ). Из приведенных результатов следует, что при учете энергии связи функция распределения достигает максимума при меньших значениях времени (см. рис. 2) и ее значение в максимуме существенно меньше. Очевидно, что последнее обстоятельство обусловлено тем, что при учете энергии связи образуется конечное число выбитых атомов, а при  $\epsilon_d = 0$  оно неограниченно возрастает (см. [18]). Следует отметить, что при увеличении энергии эти различия становятся менее заметными и при  $E \geq 20\epsilon_d$  они практически исчезают.

Найдем каскадную функцию  $\nu(E_0)$ , представляющую собой полное число атомов решетки, приходящихся на один первично выбитый атом с энергией



**Рис. 4.** Зависимость функции распределения от времени, построенная по формуле (28) при различных значениях безразмерной энергии  $\tilde{\epsilon} = E/\epsilon_d$ : 1 —  $\tilde{\epsilon} = 20$ , 2 —  $\tilde{\epsilon} = 10$ , 3 —  $\tilde{\epsilon} = 5$ , 4 —  $\tilde{\epsilon} = 1$ , при учете (сплошные кривые) и без учета (штриховые кривые) энергии связи

$E_0$ . Из выражения (2) получим, что полное число выбитых атомов равно

$$N(E_0) = \int_{\epsilon_d}^{E_0} dE p(E) \int_0^{\infty} dt \Psi(E, t) \quad (29)$$

или



$$\begin{aligned}\nu(E_0) &= \frac{N(E_0)}{N_0} = \\ &= \frac{1}{N_0} \int_{\varepsilon_d}^{E_0} dE p(E) \tilde{\Psi}_0(E, s=0), \quad (30)\end{aligned}$$

где  $\tilde{\Psi}_0(E, s=0)$  определяется формулой (25).

Подставив (25) в (30) и пренебрегая членами порядка  $\varepsilon_d/E_0$  по сравнению с единицей, для каскадной функции получим следующее выражение (см. также [8]):

$$\begin{aligned}\nu(E_0) &= \nu_0 \left( \frac{E_0}{\varepsilon_d} \right), \\ \nu_0 &\simeq 2 \left( \frac{3 - \sqrt{5}}{3 + \sqrt{5}} \right)^{3/2\sqrt{5}} \simeq 0.55.\end{aligned} \quad (31)$$

Численные расчеты, проведенные по формуле (30), показали, что при изменении  $E_0$  от  $10^6$  до  $10^3$  эВ значение  $\nu_0$  изменяется от 0.55 до 0.53 (при это полагалось, что  $\varepsilon_d = 10$  эВ). Полученное выражение (31) хорошо согласуется с формулой Кинчина–Пиза ( $\nu_0 = 0.5$  см. [2]).

## 5. ВЫВОДЫ

На основе решения модельного кинетического уравнения Больцмана получена функция распределения, описывающая нестационарное энергетическое распределение каскада замедляющихся атомов в твердом теле с учетом их размножения. Предполагалось, что твердое тело состоит из одинаковых атомов, энергия связи которых равна  $\varepsilon_d$ . Кроме того, полагалось, что сечение рассеяния движущихся атомов является упругим и сферически-симметричным в системе центра инерции, а его величина постоянна.

Следует отметить, что интегралы, входящие в (26), (27), выражаются через элементарные функции (см. [24]). В таком случае сама функция распределения (28) при сделанных предположениях представляет собой относительно простое, хотя и громоздкое алгебраическое выражение, которое при  $\varepsilon_d = 0$  хорошо согласуется с точным решением соответствующей задачи (см. рис. 1). На основе полученной функции распределения (28) проанализированы особенности развития каскада, связанные с учетом энергии связи атомов и имеющие общий характер.

Кроме того, очевидно, что решение уравнения (17) в виде (21) может быть получено и для произвольной зависимости сечения рассеяния от энергии.

В этом случае временные моменты (см. (22)–(24)) будут содержать интегралы, требующие численных расчетов для вычисления и анализа самой функции распределения.

## ЛИТЕРАТУРА

1. К. Лейман, *Взаимодействие излучения с твердым телом и образование элементарных дефектов*, Атомиздат, Москва (1979).
2. С. Вас Гэри, *Основы радиационного материаловедения. Металлы и сплавы*, Техносфера, Москва (2014).
3. И. А. Портных, А. В. Козлов, ФММ **119**, 636 (2018).
4. Л. С. Васильев, С. Л. Ломаев, ФММ **120**, 771 (2019).
5. А. Р. Исинбаев, И. А. Портных, А. В. Козлов, ФММ **121**, 99 (2020).
6. Р. Е. Воскобойников, ФММ **120**, 3 (2019).
7. Р. Е. Воскобойников, ФММ **121**, 10 (2020).
8. A. I. Ryazanov and E. V. Metelkin, Rad. Effects **52**, 15 (1980).
9. Y. Sato, S. Kojimo, T. Yoshiie et al., J. Nucl. Mater. **179–181**, 901 (1991).
10. Y. Sato, T. Yoshiie, and M. Kiritani, J. Nucl. Mater. **191–194**, 1101 (1992).
11. Е. В. Метелкин, А. И. Рязанов, Атомная энергия **83**, 183 (1997).
12. Е. В. Метелкин, А. И. Рязанов, Е. В. Семенов, ЖЭТФ **134**, 469 (2008).
13. A. I. Ryazanov, E. V. Metelkin, and E. V. Semenov, J. Nucl. Mater. **386–388**, 132 (2009).
14. A. A. Aleksandrov, V. A. Akatev, E. V. Metelkin, and E. J. Barycheva, Herald of the Bauman Moscow State Technical University, Series Natural Sciences № 1, 27 (2019).
15. J. Lindhard, V. Nielsen, and M. Scharff, Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk. **36**, 1 (1968).
16. В. А. Акатьев, Е. В. Метелкин, А. М. Савинов, Атомная энергия **122**, 295 (2017).
17. Е. В. Метелкин, М. В. Лебедева, А. В. Черняев, Атомная энергия **125**, 184 (2018).

18. A. A. Aleksandrov, V. A. Akatev, E. V. Metelkin, and E. J. Barycheva, Herald of the Bauman Moscow State Technical University, Series Natural Sciences, №6, 40 (2019).
19. Е. В. Метелкин, А. Н. Манвелов, А. Я. Пономарев и др., ФММ **120**, 892 (2019).
20. Е. В. Метелкин, В. А. Акатъев, В. И. Шмырев и др., ЖЭТФ **156**, 387 (2019).
21. А. И. Исаков, М. В. Казарновский, Ю. А. Медведев и др., *Нестационарное замедление нейтронов. Основные закономерности и некоторые приложения*, Наука, Москва (1984).
22. Е. В. Метелкин, М. В. Лебедева, ФММ **122**, 446 (2021).
23. Г. Бейтман, А. Эрдейи, *Таблицы интегральных преобразований*, Том 1. Преобразования Фурье, Лапласа, Меллина, Наука, Москва (1969).
24. И. С. Градштейн, И. М. Рыжик, *Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений*, Наука, Москва (1971).