
**ПРОЧНОСТЬ
И ПЛАСТИЧНОСТЬ**

УДК 539.12.043

**МОДЕЛЬ РАЗВИТИЯ КАСКАДА ВЫБИТЫХ АТОМОВ
В ТВЕРДОМ ТЕЛЕ**

© 2019 г. **Е. В. Метелкин^а*, А. Н. Манвелов^а, А. Я. Пономарев^а, В. И. Шмырев^а**

^а*Российский государственный социальный университет,
ул. Вильгельма Пика, 4, стр. 1, Москва, 129226 Россия*

**e-mail: sitech47@mail.ru*

Поступила в редакцию 20.11.2018 г.

После доработки 20.11.2018 г.

Принята к публикации 21.01.2019 г.

На основе решения кинетического уравнения Больцмана определяется нестационарная функция распределения, описывающая энергетическое распределение каскада движущихся атомов с учетом их размножения. Развитие каскада рассматривается в материалах, состоящих из одинаковых атомов, без учета энергии связи атомов в узлах решетки. Предполагается, что рассеяние движущихся атомов является упругим и сферически симметричным в системе центра инерции, а сечение взаимодействия является величиной, обратно пропорциональной скорости. Использование перечисленных приближений позволяет получить простые аналитические формулы для нестационарной функции распределения каскада замедляющихся атомов и проанализировать ее основные характерные особенности. С другой стороны, на основе полученных результатов можно оценивать точность различных приближенных решений.

Ключевые слова: кинетическое уравнение, столкновения, каскад атомов, замедление атомов, сечение взаимодействия

DOI: 10.1134/S001532301906007X

ВВЕДЕНИЕ

Создание ядерных реакторов и проектирование будущих термоядерных установок тесно связано с проблемой выбора для них радиационно-стойких материалов, поскольку их корпуса и отдельные элементы должны выдерживать продолжительное воздействие радиации. Радиационно-индуцированное охрупчивание материалов реакторов накладывает существенные ограничения на срок их службы.

Облучение твердых тел быстрыми частицами (особенно нейтронами) приводит к тому, что атомы кристаллической решетки, получившие от налетающей частицы энергию, большую некоторой пороговой величины, вылетают из своих равновесных положений. Дальнейший обмен энергией между движущимися атомами и атомами, находящимися в узлах кристаллической решетки, приводит к появлению новых поколений выбитых атомов. В результате возникает так называемый каскад атомных столкновений. В результате развития каскада в твердом теле образуются точечные дефекты — вакансии и междоузельные атомы, определяющие степень повреждения материала [1, 2]. В связи с этим большой интерес представляет исследование энергетического рас-

пределения каскада атомных столкновений и его развитие во времени.

Исследованию развития каскадов атомных столкновений в твердом теле посвящено достаточно большое количество работ [3–9]. В работе [3] с помощью построенной модельной индикатрисы рассеяния получено приближенное стационарное энергетическое распределение каскада движущихся атомов для произвольных потенциалов межатомного взаимодействия. В работах [4, 5] проанализирована возможность образования субкаскадов — ряда неперекрывающихся между собой областей в процессе развития каскада атомных столкновений. Оценка пороговой энергии образования субкаскадов проведена в работе [6]. В работе [7] 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) 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 результа-

тов, представленных в [7], в работе [8] проведены численные расчеты для конкретных материалов.

Следует отметить, что в работе [7] была найдена функция распределения, описывающая стационарное энергетическое распределение каскада движущихся атомов с учетом их размножения для наиболее простого частного случая упругого, сферически симметричного рассеяния в системе центра масс без учета энергии связи атомов в узлах решетки. В работе [9] на основе решения кинетического уравнения Больцмана рассчитана функция распределения по энергиям, описывающая стационарное энергетическое распределение каскада движущихся атомов при степенном потенциале взаимодействия ($U \sim 1/r^n$ [10]) с учетом энергии связи атомов в узлах решетки.

Кроме этого, на основе представлений, развитых в [7], в работе [11] определены пространственные и временные характеристики первично выбитых релятивистских электронов (ПВЭ), замедляющихся в веществе за счет ионизационных потерь: зависимость энергии ПВЭ от времени, зависимость энергии замедляющегося ПВЭ от пройденного пути и зависимость пути, пройденного ПВЭ, от времени замедления. В работе [12] эти представления были использованы для вычисления стационарного энергетического распределения релятивистских электронов, замедляющихся в веществе за счет ионизационных потерь, с учетом их размножения.

В настоящей работе на основе решения кинетического уравнения Больцмана определяется нестационарная функция распределения, описывающая замедление каскада движущихся атомов, с учетом их размножения. Решение носит модельный характер, поскольку предполагается, что рассеяние движущихся атомов является упругим и сферически симметричным в системе центра инерции, а сечение взаимодействия обратно пропорционально их скорости.

Преимущество использования перечисленных приближений состоит в том, что в этом случае удастся найти точное решение кинетического уравнения и получить простые аналитические формулы для нестационарной функции распределения каскада замедляющихся атомов. На основе полученного решения можно проанализировать основные особенности его развития. Кроме того, с помощью полученных результатов можно оценивать точность различных приближенных решений.

ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

В настоящей работе будем рассматривать твердое тело, состоящее из атомов одного сорта, энергией связи которых в узлах решетки будем пренебрегать. Кинетическое уравнение, описывающее

нестационарное энергетическое распределение движущихся атомов от мгновенного равномерно распределенного по пространству моноэнергетического источника, имеет следующий вид [13]:

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

где $f(E, t)dE$ – число 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 – их скорость; $P(E' \rightarrow E) = \Sigma(E' \rightarrow E) / \Sigma(E')$ – индикатриса рассеяния (вероятность того, что движущийся атом с энергией E' в результате соударения 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.

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

В случае упругого, сферически симметричного рассеяния в системе центра инерции индикатриса рассеяния имеет следующий вид [13]:

$$P(E' \rightarrow E) = 1/E'. \quad (2)$$

С учетом этого обстоятельства уравнение (1) принимает следующий вид:

$$\begin{aligned} \frac{1}{v \Sigma(E)} \frac{\partial \Psi(E, t)}{\partial t} + \Psi(E, t) = \\ = 2 \int_E^{E_0} \frac{dE'}{E'} \Psi(E', t) + N_0 \delta(E - E_0) \delta(t), \end{aligned} \quad (3)$$

где $\Psi(E, t) = \Sigma(E) \Phi(E, t)$ – плотность столкновений движущихся атомов.

РЕШЕНИЕ КИНЕТИЧЕСКОГО УРАВНЕНИЯ

Применяя к обеим частям уравнения (3) преобразование Лапласа по времени [14]

$$\tilde{\Psi}(E, p) = \int_0^{\infty} \exp(-pt) \Psi(E, t) dt \quad (4)$$

и предполагая, что сечение рассеяния имеет следующий вид:

$$\Sigma(E) = \Sigma_0/v, \quad \Sigma_0 = \text{const}, \quad (5)$$

получим:

$$\begin{aligned} \left(\frac{p}{\Sigma_0} + 1\right) \tilde{\Psi}(E, p) = \\ = 2 \int_E^{E_0} \frac{dE'}{E'} \tilde{\Psi}(E', p) + N_0 \delta(E - E_0). \end{aligned} \quad (6)$$

Выделим в решении уравнения (6) нерассеянное излучение:

$$\tilde{\Psi}(E, p) = \tilde{\Psi}_0(E, p) + \frac{N_0 \delta(E - E_0)}{\left(\frac{p}{\Sigma_0} + 1\right)}. \quad (7)$$

Подставив (7) в (6), получим уравнение для определения функции $\tilde{\Psi}_0$:

$$\begin{aligned} \left(\frac{p}{\Sigma_0} + 1\right) \tilde{\Psi}_0(E, p) = \\ = 2 \int_E^{E_0} \frac{dE'}{E'} \tilde{\Psi}_0(E', p) + \frac{2N_0}{E_0 \left(\frac{p}{\Sigma_0} + 1\right)}. \end{aligned} \quad (8)$$

Продифференцировав уравнение (8) по энергии, получим дифференциальное уравнение для функции $\tilde{\Psi}_0(E, p)$

$$\frac{\partial \tilde{\Psi}_0(E, p)}{\partial E} = -\frac{1}{E} \frac{2}{\left(1 + \frac{p}{\Sigma_0}\right)} \tilde{\Psi}_0(E, p), \quad (9)$$

решение которого, исходя из (8), должно удовлетворять следующему начальному условию:

$$\tilde{\Psi}_0(E_0, p) = \frac{2N_0}{E_0 \left(\frac{p}{\Sigma_0} + 1\right)^2}. \quad (10)$$

Интегрируя (9) с учетом (10), найдем:

$$\tilde{\Psi}_0(E, p) = \frac{2N_0 \Sigma_0^2}{E_0 (p + \Sigma_0)^2} \left(\frac{E_0}{E}\right)^{\frac{2\Sigma_0}{p + \Sigma_0}}. \quad (11)$$

Заметим, что при $p = 0$ выражение (11) совпадает с решением соответствующей стационарной задачи, представленным в [7].

Для образа Лапласа функции распределения получим (см (7)):

$$\begin{aligned} \tilde{f}(E, p) = \frac{\tilde{\Psi}(E, p)}{\Sigma_0} = \\ = \frac{2N_0 \Sigma_0}{E_0 (p + \Sigma_0)^2} \left(\frac{E_0}{E}\right)^{\frac{2\Sigma_0}{p + \Sigma_0}} + \frac{N_0 \delta(E - E_0)}{(p + \Sigma_0)}. \end{aligned} \quad (12)$$

Применяя к (12) обратное преобразование Лапласа [14], для функции распределения получим следующий окончательный результат:

$$\begin{aligned} f(E, t) = N_0 \exp(-\tau) \delta(E - E_0) + \\ + \frac{N_0}{E_0 \ln\left(\frac{1}{\varepsilon}\right)} \exp(-\tau) \sqrt{2\tau \ln\left(\frac{1}{\varepsilon}\right)} I_1\left(2\sqrt{2\tau \ln\left(\frac{1}{\varepsilon}\right)}\right), \end{aligned} \quad (13)$$

где $I_1(z)$ – модифицированная функция Бесселя первого порядка [15]; $\tau = \Sigma_0 t$ – безразмерное время; $\varepsilon = (E/E_0)$ – безразмерная энергия.

АНАЛИЗ ПОЛУЧЕННЫХ РЕЗУЛЬТАТОВ

Проанализируем полученный результат (13). Рассмотрим сначала законы сохранения числа частиц и энергии в каскаде движущихся атомов.

Найдем изменение со временем полного числа атомов в каскаде:

$$N(t) = \int_0^{E_0} dE f(E, t). \quad (14)$$

Для этого найдем его образ Лапласа:

$$\tilde{N}(p) = \int_0^{E_0} dE \tilde{f}(E, p). \quad (15)$$

Подставив (12) в (15), получим:

$$\tilde{N}(p) = \frac{N_0}{(p - \Sigma_0)}. \quad (16)$$

Используя обратное преобразование Лапласа [14] получим:

$$N(t) = N_0 \exp(\Sigma_0 t). \quad (17)$$

Из (17), как и следовало ожидать, вытекает, что число движущихся атомов в каскаде со временем нарастает. Причем в данном случае этот рост не ограничен, так как мы не учитываем энергию связи покоящихся атомов.

Теперь найдем изменение со временем полной энергии частиц в каскаде:

$$E(t) = \int_0^{E_0} dE E f(E, t). \quad (18)$$

Поступая аналогичным образом, получим:

$$E(t) = N_0 E_0 = \text{const.} \quad (19)$$

Из (19) вытекает, что несмотря на рост числа движущихся атомов, их полная энергия сохраняется. Это объясняется тем, что мы не учитываем энергию связи покоящихся атомов.

Поэтому энергия, с которой начал двигаться после соударения покоящийся атом, целиком равна энергии, переданной ему движущимся атомом.

Проанализируем подробнее функцию распределения (13) и ее особенности, связанные с увеличением числа атомов в каскаде. При малых значениях аргумента

$$\tau \ll \frac{1}{8 \ln\left(\frac{1}{\varepsilon}\right)} \quad (20)$$

функция Бесселя принимает вид [15]:

$$I_1(z) \approx \frac{z}{2} \quad \text{или} \\ I_1\left(2\sqrt{2\tau \ln\left(\frac{1}{\varepsilon}\right)}\right) \approx \sqrt{2\tau \ln\left(\frac{1}{\varepsilon}\right)}. \quad (21)$$

В этом случае функция распределения (13) при $E < E_0$ будет равна

$$f(E, t) = \frac{2N_0}{E_0} \tau \exp(-\tau). \quad (22)$$

При $\tau = 1$ она достигает максимума, равного

$$f_{\max} = \frac{2N_0}{eE_0}. \quad (23)$$

Это значение не зависит от энергии, поскольку приближение (22) справедливо при энергиях, близких к энергии источника (см. (20)).

При больших значениях аргумента

$$\tau \gg \frac{1}{8 \ln\left(\frac{1}{\varepsilon}\right)}. \quad (24)$$

функция Бесселя принимает вид [15]:

$$I_1(z) \approx \frac{\exp(z)}{\sqrt{2\pi z}} \quad \text{или} \\ I_1\left(2\sqrt{2\tau \ln\left(\frac{1}{\varepsilon}\right)}\right) \approx \frac{\exp\left(2\sqrt{2\tau \ln\left(\frac{1}{\varepsilon}\right)}\right)}{2\sqrt{\pi}\left(2\tau \ln\left(\frac{1}{\varepsilon}\right)\right)^{1/4}}. \quad (25)$$

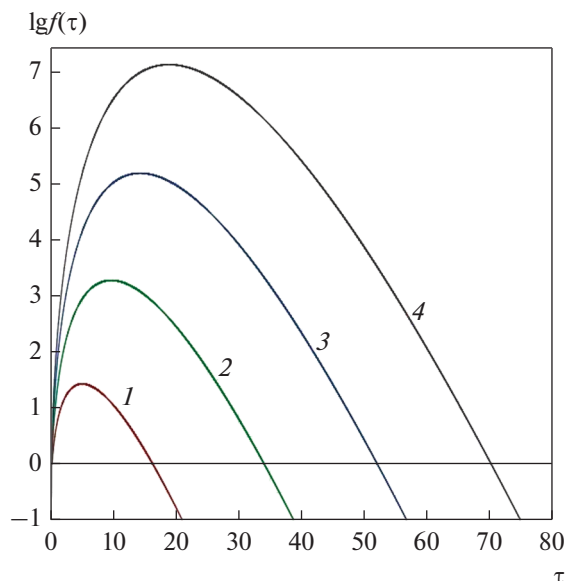


Рис. 1. Зависимость функции распределения от времени τ при различных значениях энергии ε (1 – 0.1; 2 – 0.01; 3 – 0.001; 4 – 0.0001).

Функция распределения (13) при $E < E_0$ в этом случае будет равна

$$f(E, t) = \frac{N_0}{2\sqrt{\pi}E_0 \ln\left(\frac{1}{\varepsilon}\right)} \left(2\tau \ln\left(\frac{1}{\varepsilon}\right)\right)^{1/4} \times \exp\left(-\tau + 2\sqrt{2\tau \ln\left(\frac{1}{\varepsilon}\right)}\right). \quad (26)$$

Рассмотрим изменение этой функции при фиксированной энергии. Из (26) следует, что со временем она нарастает, достигая максимума при

$$\tau_m \approx 2 \ln\left(\frac{1}{\varepsilon}\right) = 2 \ln\left(\frac{E_0}{E}\right) \quad (27)$$

и затем убывает. Из (27) вытекает, что с уменьшением энергии максимум смещается в сторону больших времен, поскольку, чем меньше энергия, тем позже достигнут ее атомы при замедлении. Значение функции в максимуме будет равно

$$f(E, \tau_m) = \frac{N_0}{\sqrt{2\pi}E_0 \varepsilon^2 \sqrt{\ln\left(\frac{1}{\varepsilon}\right)}} = \frac{N_0}{\sqrt{2\pi}E_0} \frac{1}{\sqrt{\ln\left(\frac{E_0}{E}\right)} \left(\frac{E_0}{E}\right)^2}. \quad (28)$$

Видно, что с уменьшением энергии значение функции в максимуме быстро нарастает, за счет увеличения со временем числа атомов в каскаде.

На рис. 1 представлены изменения функции распределения ($f = fE_0/N_0$) со временем при различных значениях энергии, построенные в результате расчетов по формуле (26). Видно, что выводы, сделанные выше о характере изменения

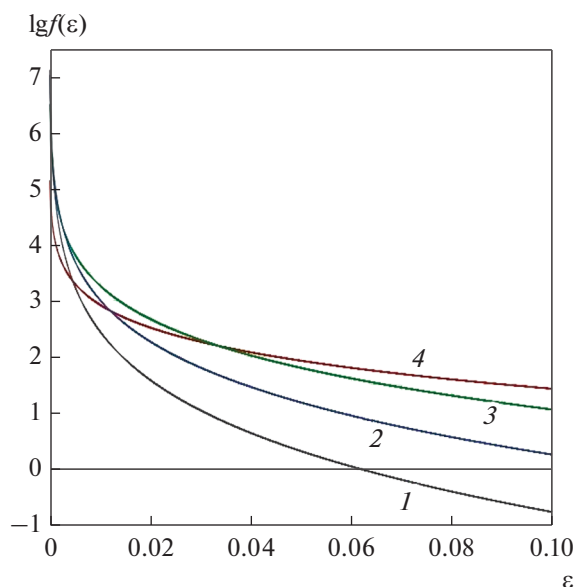


Рис. 2. Зависимость функции распределения от энергии ε в различные моменты времени τ (1 – 20; 2 – 15; 3 – 10; 4 – 5).

функции распределения, целиком согласуются с результатами расчетов, при этом формулы (27) и (28) с хорошей точностью описывают соответствующие величины.

Теперь проанализируем изменение функции (26) с энергией в различные фиксированные моменты времени. Результаты соответствующих расчетов представлены на рис. 2. Видно, что с увеличением времени атомы за счет замедления переходят в области более низких энергий. Следует отметить, что площадь под каждой из кривых на рис. 2 будет при увеличении времени возрастать согласно выражению (16), что обусловлено увеличением со временем числа движущихся атомов в каскаде.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе исследовано развитие каскада атомных столкновений в твердом теле. Предполагали, что твердое тело состоит из одинаковых атомов, энергия связи которых не учитывали, рассеяние движущихся атомов является упругим и сферически симметричным в системе центра инерции, а сечение взаимодействия является величиной, обратно пропорциональной скорости (см. (5)). Сделанные предположения позволили получить строгое решение кинетического уравнения Больцмана, описывающее нестационарное энергетическое распределение каскада замедляющихся атомов с учетом их размножения (см. (13)).

На основе полученного решения были проанализированы особенности, присущие функции распределения, обусловленные ростом числа атомов в каскаде, имеющие общий характер. Кроме того, с

помощью полученных результатов можно оценивать точность различных приближенных решений.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Лейман К. Взаимодействие излучения с твердым телом и образование элементарных дефектов. М.: Атомиздат, 1979. 297 с.
2. Вас Гэри С. Основы радиационного материаловедения. Металлы и сплавы М.: ТЕХНОСФЕРА, 2014. 992 с.
3. Ryazanov A.I., Metelkin E.V. Concerning the theory of radiation cascades of atomic collisions in a solid with an arbitrary interatomic interaction potential // Radiation Effects and Defects in Solids, 1980. V. 52. № 1–2. P. 15–23.
4. Sato Y., Kojimo S., Yoshiie T., Kiritani M. Criterion of subcascade formation in metals from atomic collision calculation // J. Nucl. Mater. 1991. № 179–181. P. 901–904.
5. Sato Y., Yoshiie T., Kiritani M. Binary collision calculation of subcascade structure and its correspondence to observe subcascade defects in 14 MeV neutron irradiated copper // J. Nuclear Mater. 1992. № 191–194. P. 1101–1104.
6. Метелкин Е.В., Рязанов А.И. Пороговая энергия образования субкаскадов // Атомная энергия. 1997. Т. 83. В. 3. С. 183–189.
7. Метелкин Е.В., Рязанов А.И., Семенов Е.В. Разработка новых теоретических моделей для исследования образования каскадов и субкаскадов атомных столкновений в облучаемых твердых телах // ЖЭТФ. 2008. Т. 134. Вып. 3(9). С. 469–480.
8. Ryazanov A.I., Metelkin E.V., Semenov E.V. Modeling of cascade and sub-cascade formation at high PKA energies in irradiated fusion structural materials // J. Nucl. Mater. 2009. № 386–388. P. 132–134.
9. Александров А.А., Акатьев В.А., Метелкин Е.В., Барышева Е.Ю. Разработка модели исследования энергетического распределения каскадов атомных столкновений // Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана, серия “Естественные науки”. 2018. (в печати)
10. Lindhard J., Vibeke Nielsen, Scharff M. Approximation Method in Classical Scattering by Screened Coulomb Fields // Det Kongelige Danske Videnskabernes Selskab Matematisk-fysiske Meddelelser. 1968. V. 36. № 10. P. 1–32.
11. Акатьев В.А., Метелкин Е.В., Савинов А.М. Пространственно-временные характеристики релятивистских электронов, замедляющихся в веществе // Атомная энергия. 2017. Т. 122. Вып. 5. С. 295–298.
12. Метелкин Е.В., Лебедева М.В., Черняев А.В. Энергетическое распределение релятивистских электронов, замедляющихся в веществе // Атомная энергия. 2018. Т. 125. Вып. 3. С. 184–186.
13. Исаков А.И., Казарновский М.В., Медведев Ю.А., Метелкин Е.В. Нестационарное замедление нейтронов. Основные закономерности и некоторые приложения. М.: Наука, 1984, 264 с.
14. Бейтман Г., Эрдейи А. Таблицы интегральных преобразований. Т. 1. Преобразования Фурье, Лапласа, Меллина. М.: Наука, 1969, 343 с.
15. Градштейн И.С., Рыжик И.М. Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений. М.: Наука, 1971, 1108 с.