

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

E. V. Метелкин, M. B. 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 (ε_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 (ε_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 междуузельные 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 индикаторы 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;

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

— индикаторика 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; ε_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 . Второй интеграл описывает 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

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

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

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 ε_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 ε_d (второе слагаемое в (7)), не выбивая его из узла решетки.

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

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

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 ε_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 индикаторной функцией, 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):

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

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 ε_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 $\tilde{\Psi}_0(E, p)$:

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

Границное 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

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

где $\Gamma(x)$ — гамма-функция [24].

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

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

Используя (20), (24), получим

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

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

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

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

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

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

4. АНАЛИЗ ПОЛУЧЕННОГО РЕШЕНИЯ

Положив в (20) $\varepsilon_d = 0$ и проводя 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

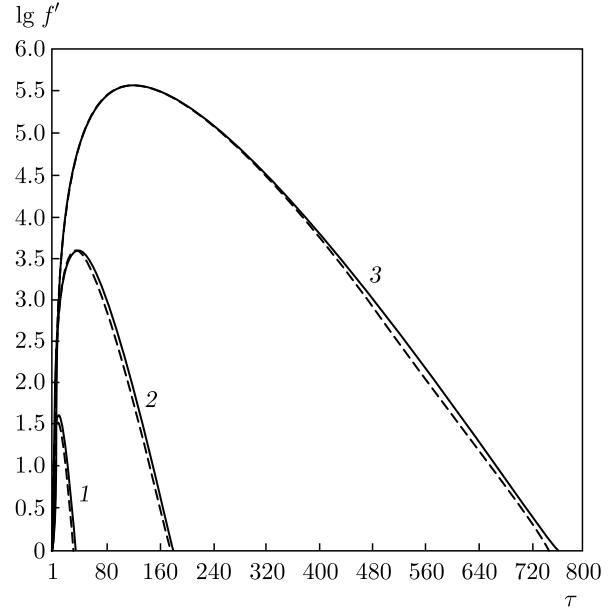


Рис. 1. Зависимость функции распределения $f'(\tau)$ от безразмерного времени τ , построенная по формуле (28) при $\varepsilon_d = 0$ (сплошные кривые) и по формуле (12) из [18] (штриховые кривые) для различных значений безразмерной энергии $\varepsilon = E/E_0$: 1 — $\varepsilon = 10^{-1}$, 2 — $\varepsilon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

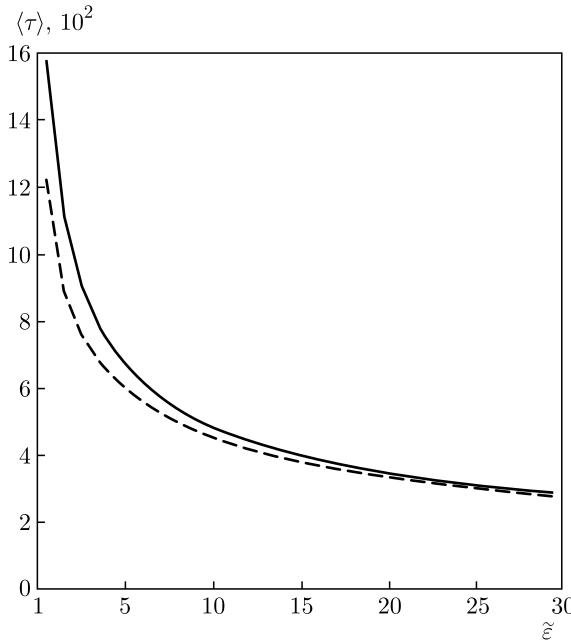


Рис. 2. Зависимости среднего времени замедления ($\langle \tau \rangle = \Sigma v_0 \langle t \rangle$) от безразмерной энергии $\tilde{\varepsilon} = E/\varepsilon_d$ (штриховая кривая — с учетом энергии связи; сплошная кривая — при $\varepsilon_d = 0$), построенные по формуле (26)

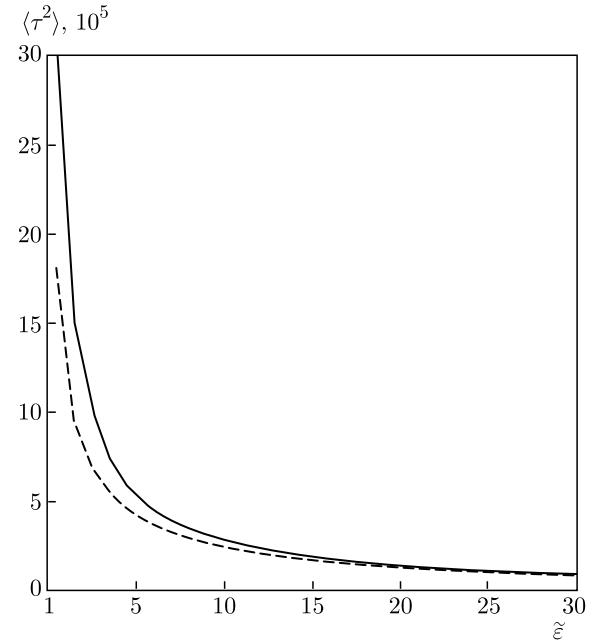


Рис. 3. Зависимости среднего квадрата времени замедления ($\langle \tau^2 \rangle = \Sigma^2 v_0^2 \langle t^2 \rangle$) от безразмерной энергии $\tilde{\varepsilon} = E/\varepsilon_d$ (штриховая кривая — с учетом энергии связи; сплошная кривая — при $\varepsilon_d = 0$), построенные по формуле (27)

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 $E_0/\varepsilon_d = 10^5$). 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 $E_0/\varepsilon_d = 10^5$). 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 $\varepsilon_d = 0$ оно неограниченно возрастает (см. [18]). Следует отметить, что при увеличении энергии эти различия становятся менее заметными и при $E \geq 20\varepsilon_d$ они практически исчезают.

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

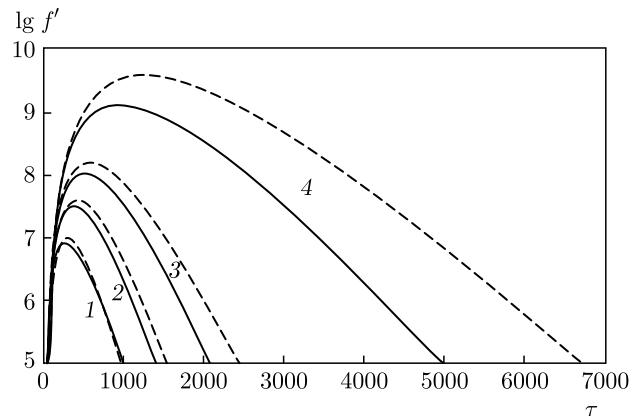


Рис. 4. Зависимость функции распределения от времени, построенная по формуле (28) при различных значениях безразмерной энергии $\tilde{\varepsilon} = E/\varepsilon_d$: 1 — $\tilde{\varepsilon} = 20$, 2 — $\tilde{\varepsilon} = 10$, 3 — $\tilde{\varepsilon} = 5$, 4 — $\tilde{\varepsilon} = 1$, при учете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

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

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

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 ε_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 ν_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 ε_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. А. И. Ryazanov and Е. В. 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. А. И. Ryazanov, Е. В. Metelkin, and Е. В. Semenov, J. Nucl. Mater. **386–388**, 132 (2009).
14. А. А. 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. Акатьев, 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).