

ПРОСТРАНСТВЕННОЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ВАКАНСИЙ, ОБРАЗОВАННЫХ КАСКАДОМ ВЫБИТЫХ АТОМОВ В ТВЕРДОМ ТЕЛЕ

Е. В. Метелжин^{}, М. В. Лебедева^а*

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

Поступила в редакцию 25 мая 2022 г.,

после переработки 25 мая 2022 г.

Принята к публикации 26 мая 2022 г.

На основе решения кинетического уравнения Больцмана получено выражение, описывающее пространственное распределение вакансий, образованных каскадом атомных столкновений в твердом теле. Это выражение представлено в простом безразмерном виде, зависящем от единственного безразмерного параметра $\varepsilon_0 = E_0/\varepsilon_d$ (E_0 — энергия первично выбитых атомов, ε_d — энергия связи атомов в узлах решетки). При решении кинетического уравнения предполагалось, что твердое тело состоит из одинаковых атомов, рассеяние движущихся атомов является упругим и сферически-симметричным в системе центра инерции, а сечение взаимодействия является постоянной величиной.

DOI: 10.31857/S0044451022110153

EDN: LABWVD

1. ВВЕДЕНИЕ

Элементы конструкций ядерных реакторов и термоядерных установок работают в условиях продолжительного радиационного облучения. Это приводит к изменению их физических, упругих и прочностных характеристик. Повреждаемость материалов нейтронным облучением во многом определяет ресурс эксплуатации ядерных установок. Понимание физических основ протекающих процессов необходимо для получения радиационно-стойких конструкционных материалов, удовлетворяющих потребности ядерной техники.

Облучение твердых тел быстрыми нейтронами приводит к тому, что атомы кристаллической решетки, получившие от налетающей частицы энергию, большую некоторой пороговой величины (ε_d), вылетают из своих равновесных положений. В дальнейшем обмен энергии между движущимися атомами и атомами, находящимися в узлах кристаллической решетки, приводит к появлению новых поколений выбитых атомов. В результате возникает так на-

зываемый каскад атомных столкновений. При развитии каскада столкновений в твердом теле образуется целый комплекс дефектов (вакансии и межузельные атомы, кластеры и т. д.), определяющих степень повреждения материала и его дальнейшие физические свойства [1–5]. В связи с этим исследование процессов, протекающих в каскаде атомных столкновений, представляет большой интерес.

Описание развития каскадов в твердом теле и сопровождающих его процессов представляет собой достаточно сложную задачу. В связи с этим для ее решения в подавляющем большинстве случаев используется компьютерное моделирование [2, 6–8]. Аналитические решения соответствующей задачи на основе линейного уравнения Больцмана существуют в исключительных случаях. Тем не менее они также представляют значительный интерес, поскольку дают наглядное представление о протекающем процессе и его особенностях и могут быть использованы для тестирования достаточно сложных численных расчетов.

Исследованию развития каскадов атомных столкновений в твердом теле на основе аналитического решения кинетического уравнения Больцмана было посвящено достаточно большое количество работ [9–22]. В [9, 10] с помощью построенной модельной индикатрисы рассеяния было получе-

^{*} E-mail: sitech47@mail.ru

но стационарное энергетическое распределение каскада движущихся атомов для произвольного потенциала межатомного взаимодействия. В работах [11–13] анализировалась возможность образования субкаскадов — ряда неперекрывающихся между собой областей в процессе развития каскада атомных столкновений. В работе [14] была разработана теоретическая модель для исследования образования каскадов и субкаскадов атомных столкновений в облучаемых твердых телах, основанная на использовании расширенного толкования понятия первично выбитый атом (ПВА). В [14] 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 [14], в работе [15] были проведены численные расчеты для конкретных материалов, согласующиеся с экспериментальными данными.

В работе [16] была рассчитана функция распределения по энергиям, описывающая стационарное энергетическое распределение каскада движущихся атомов при степенном потенциале взаимодействия ($U \sim 1/r^n$ [17]) с учетом энергии связи атомов в узлах решетки.

В работах [18–20] было получено точное решение кинетического уравнения Больцмана при условии, что материал состоит из одинаковых атомов, рассеяние движущихся атомов является упругим и сферически-симметричным в системе центра инерции, а энергии связи атомов в узлах решетки не учитывалась ($\varepsilon_d = 0$). В [18, 19] было получено решение, описывающее нестационарное энергетическое распределение каскада движущихся атомов. 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] с использованием P_1 и диффузионно-транспортного приближений было получено нестационарное пространственно-энергетическое распределение каскада выбитых атомов (при $\Sigma = \text{const}$).

При тех же условиях в работах [21, 22] было получено решение модельного уравнения Больцмана с учетом энергии связи атомов в узлах решетки ($\varepsilon_d \neq 0$). В [21] сечение рассеяния полагалось обратно пропорциональным скорости ($\Sigma = \Sigma_0/v$; $\Sigma_0 = \text{const}$), а в [22] оно считалось постоянной величиной ($\Sigma = \text{const}$).

В настоящей работе на основе решения модельного кинетического уравнения Больцмана (см. [22])

получено выражение, описывающее пространственное распределение вакансий, образующихся при распространении каскада движущихся атомов в твердом теле. Это выражение представлено в простом безразмерном виде, зависящем от единственного безразмерного параметра $\varepsilon_0 = E_0/\varepsilon_d$ (E_0 — энергия первично выбитых атомов (ПВА)). При решении кинетического уравнения предполагалось, что твердое тело состоит из одинаковых атомов, рассеяние движущихся атомов является упругим и сферически-симметричным в системе центра инерции, а сечение взаимодействия является постоянной величиной.

2. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Рассмотрим распространение каскада выбитых атомов в твердом теле, состоящем из одинаковых атомов. Кинетическое уравнение Больцмана, описывающее этот процесс, при использовании P_1 и диффузионно-транспортного приближений имеет следующий вид [22, 23]:

$$\begin{aligned} \frac{1}{v} \frac{\partial \Phi(E, \mathbf{r}, t)}{\partial t} - \frac{1}{3\Sigma_{tr}} \Delta_r \Phi(\mathbf{r}, E, t) + \Sigma(E) \Phi(E, \mathbf{r}, t) = \\ = \int_E^{E_0} dE' P(E' \rightarrow E) \Sigma(E') \Phi(E', \mathbf{r}, t) + \\ + \int_{E+\varepsilon_d}^{E_0} dE' P(E' \rightarrow E' - E - \varepsilon_d) \Sigma(E') \Phi(E', \mathbf{r}, t) + \\ + N_0 \delta(E - E_0) \delta(\mathbf{r}) \delta(t), \quad (1) \end{aligned}$$

где $f(E, \mathbf{r}, t) dE d\mathbf{r}$ — число атомов с энергией E в интервале dE в момент времени t в объеме $d\mathbf{r}$ около точки \mathbf{r} ;

$$\Phi(E, \mathbf{r}, t) = v f(E, \mathbf{r}, t)$$

— 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;

$$\Sigma_{tr}(E) = (1 - \mu_l) \Sigma(E)$$

— транспортное сечение; μ_l — средний косинус угла рассеяния частицы в лабораторной системе координат; Δ_r — оператор Лапласа; $\delta(x)$ — дельта-функция Дирака; E_0 — начальная энергия первично выбитых

атомов (ПВА); N_0 — их полное число; ε_d — энергия связи атомов в узлах решетки. Источник ПВА считается изотропным, точечным, импульсным и монохроматическим.

Первый интеграл, стоящий в правой части кинетического уравнения (1), описывает переход в результате рассеяния 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 работе [20] 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 [22]:

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

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

где

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

$$E(t) = \int_0^{E_0} dE E \int d\mathbf{r} f(E, \mathbf{r}, t),$$

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

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 $E \leq \varepsilon_d$ и

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

при $E \geq \varepsilon_d$. Величина $p(E)$ представляет собой вероятность, 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. Сами законы сохранения (2), (3) подробно обсуждаются в [22].

Следуя работе [22], упростим уравнение (1), потребовав, чтобы из упрощенного уравнения вытекали те же законы сохранения, что и из уравнения (1) (см. (2)–(7)). В таком случае для упрощенного уравнения при $E \geq \varepsilon_d$ получим следующее выражение:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{v} \frac{\partial \Phi(E, \mathbf{r}, t)}{\partial t} - \frac{1}{3\Sigma_{tr}} \Delta_r \Phi(\mathbf{r}, E, t) + \\ & + \Sigma(E) \left[\frac{\Delta_0(E)}{\Delta(E)} + p(E) \right] \Phi(E, \mathbf{r}, t) = \\ & = \int_E^{E_0} dE' P(E' \rightarrow E) \Sigma(E') \left[\frac{\Delta_0(E')}{\Delta(E')} + p(E') \right] \Phi(E', \mathbf{r}, t) + \\ & + \int_E^{E_0} dE' P(E' \rightarrow E' - E) \Sigma(E') p(E') \Phi(E', \mathbf{r}, t) + \\ & + N_0 \delta(E - E_0) \delta(\mathbf{r}) \delta(t). \quad (8) \end{aligned}$$

3. РЕШЕНИЕ КИНЕТИЧЕСКОГО УРАВНЕНИЯ

Далее будем считать, что рассеяние движущихся атомов на покоящихся является сферически-симметричным в системе центра инерции и описывается индикатрисой рассеяния, имеющей следующий вид [23]:

$$P(E' \rightarrow E) = \frac{1}{E'} \Theta(E' - E), \quad (9)$$

где $\Theta(z)$ — единичная функция Хевисайда. В таком случае при $E \geq \varepsilon_d$ уравнение (8) принимает следующий вид (см. (5)–(7), (9)):

$$\begin{aligned} & \frac{1}{v\Sigma} \frac{\partial \Psi(E, \mathbf{r}, t)}{\partial t} - \\ & - \frac{1}{3\Sigma_{tr}} \Delta_r \Psi(\mathbf{r}, E, t) + \left[1 + \frac{\varepsilon_d}{E} - \left(\frac{\varepsilon_d}{E} \right)^2 \right] \Psi(E, \mathbf{r}, t) = \\ & = \int_E^{E_0} \frac{dE'}{E'} \left[2 - \left(\frac{\varepsilon_d}{E'} \right)^2 \right] \Psi(E', \mathbf{r}, t) + \\ & + N_0 \delta(E - E_0) \delta(\mathbf{r}) \delta(t), \quad (10) \end{aligned}$$

где $\Psi(\mathbf{r}, E, t) = \Sigma(E) \Phi(\mathbf{r}, E, t)$ — плотность соударений и $\mu_l = 2/3$ [23].

Применяя к уравнению (10) преобразование Лапласа по времени и преобразование Фурье по пространственным координатам:

$$\tilde{\Psi}(E, \mathbf{k}, s) = \int_0^\infty dt \exp(-st) \times \int_{-\infty}^\infty \int_{-\infty}^\infty \int_{-\infty}^\infty dx dy dz \exp(-i\mathbf{k}\mathbf{r}) \Psi(\mathbf{r}, E, t), \quad (11)$$

получим

$$\left[\frac{s}{v\Sigma} + \frac{k^2}{3\Sigma\Sigma_{tr}} + 1 + \frac{\varepsilon_d}{E} - \left(\frac{\varepsilon_d}{E}\right)^2 \right] \tilde{\Psi}(E, \mathbf{k}, s) = \int_E^{E_0} \frac{dE'}{E'} \left[2 - \left(\frac{\varepsilon_d}{E'}\right)^2 \right] \Psi(E', \mathbf{k}, s) + N_0 \delta(E - E_0). \quad (12)$$

Выделим в решении уравнения (12) нерассеянное излучение:

$$\tilde{\Psi}(E, \mathbf{k}, s) = \tilde{\Psi}_0(E, \mathbf{k}, s) + \frac{N_0 \delta(E - E_0)}{\left[1 + \frac{s}{v\Sigma} + \frac{k^2}{3\Sigma\Sigma_{tr}} + \frac{\varepsilon_d}{E} - \left(\frac{\varepsilon_d}{E}\right)^2 \right]}. \quad (13)$$

Подставив (13) в (12) и положив $\Sigma = \text{const}$, получим уравнение для определения функции $\tilde{\Psi}_0(E, \mathbf{k}, s)$:

$$\frac{d}{dE} \tilde{\Psi}_0(E, \mathbf{k}, s) = - \frac{\left[2 - \frac{s}{2v\Sigma} - \frac{\varepsilon_d}{E} + \left(\frac{\varepsilon_d}{E}\right)^2 \right]}{E \left[1 + \frac{s}{v\Sigma} + \frac{k^2}{3\Sigma\Sigma_{tr}} + \frac{\varepsilon_d}{E} - \left(\frac{\varepsilon_d}{E}\right)^2 \right]} \times \tilde{\Psi}_0(E, \mathbf{k}, s), \quad (14)$$

решение которого легко найти (см. [21, 22]):

$$\tilde{\Psi}_0(E, \mathbf{k}, s) = \frac{N_0 \left[2 - \left(\frac{\varepsilon_d}{E_0}\right)^2 \right]}{E_0 \left[1 + \frac{s}{v_0\Sigma} + \frac{k^2}{3\Sigma\Sigma_{tr}} + \frac{\varepsilon_d}{E_0} - \left(\frac{\varepsilon_d}{E_0}\right)^2 \right]^2} \times \exp \left\{ \int_E^{E_0} \frac{dE' \left[2 - \frac{s}{2v'\Sigma} - \frac{\varepsilon_d}{E'} + \left(\frac{\varepsilon_d}{E'}\right)^2 \right]}{E' \left[1 + \frac{s}{v'\Sigma} + \frac{k^2}{3\Sigma\Sigma_{tr}} + \frac{\varepsilon_d}{E'} - \left(\frac{\varepsilon_d}{E'}\right)^2 \right]} \right\}. \quad (15)$$

Функция (15) представляет собой образ Лапласа-Фурье от нестационарного пространственно-энергетического распределения плотности соударений каскада движущихся атомов в твердом

теле. Найдем образ Фурье от пространственно-энергетического распределения полной плотности соударений, которые испытал каскад движущихся атомов при своем развитии (при $E \geq \varepsilon_d$):

$$\tilde{\Psi}_0(E, \mathbf{k}) = \int_0^\infty dt \int_{-\infty}^\infty \int_{-\infty}^\infty dx dy dz \exp(-i\mathbf{k}\mathbf{r}) \Psi_0(\mathbf{r}, E, t). \quad (16)$$

Учитывая (11), найдем (см. (15))

$$\tilde{\Psi}_0(E, \mathbf{k}) = \tilde{\Psi}_0(E, \mathbf{k}, s = 0) = \frac{N_0 \left[2 - \left(\frac{\varepsilon_d}{E_0}\right)^2 \right]}{E_0 \left[1 + \frac{k^2}{3\Sigma\Sigma_{tr}} + \frac{\varepsilon_d}{E_0} - \left(\frac{\varepsilon_d}{E_0}\right)^2 \right]^2} \times \exp \left\{ \int_E^{E_0} \frac{dE' \left[2 - \frac{\varepsilon_d}{E'} + \left(\frac{\varepsilon_d}{E'}\right)^2 \right]}{E' \left[1 + \frac{k^2}{3\Sigma\Sigma_{tr}} + \frac{\varepsilon_d}{E'} - \left(\frac{\varepsilon_d}{E'}\right)^2 \right]} \right\}. \quad (17)$$

Вернувшись к уравнению (12), можно заметить, что выражение (17) представляет собой образ Фурье от пространственно-энергетического распределения плотности соударений каскада движущихся атомов, образующегося от точечного стационарного источника.

Вычисление оригинала по формуле (17) связано с определенными математическими трудностями. В связи с этим функцию $\Psi_0(E, \mathbf{r})$ будем искать в следующем виде:

$$\Psi_0(E, \mathbf{r}) = A(E) \exp[-\alpha(E)r^2]. \quad (18)$$

Параметры $A(E)$ и $\alpha(E)$ найдем из условия, чтобы пространственные моменты от функции (18),

$$\Psi_0(E) = \int d\mathbf{r} \Psi_0(E, \mathbf{r}), \quad (19)$$

$$\langle r^2(E) \rangle = \frac{1}{\Psi_0(E)} \int d\mathbf{r} r^2 \Psi_0(E, \mathbf{r}), \quad (20)$$

совпадали с аналогичными величинами, полученными из выражения (17). Используя (18), найдем

$$A(E) = \left[\frac{3}{2\pi \langle r^2(E) \rangle} \right]^{\frac{3}{2}} \Psi_0(E), \quad (21)$$

$$\alpha^2(E) = \frac{3}{2 \langle r^2(E) \rangle}.$$

Пространственные моменты (19), (20) можно определить с помощью выражения (17) по формулам

$$\Psi_0(E) = \tilde{\Psi}_0(E, k = 0),$$

$$\langle r^2(E) \rangle = - \left\{ \frac{[\Delta_k \tilde{\Psi}_0(E, \mathbf{k})]}{\tilde{\Psi}_0(E, \mathbf{k})} \right\}_{k=0}, \quad (22)$$

где Δ_k — оператор Лапласа в k -пространстве. Проведем вычисления по формулам (22), получим выражения для пространственных моментов в следующем безразмерном виде:

$$\begin{aligned} \Psi'(\varepsilon) &= \Psi_0(E) \frac{E_0}{N_0} = \\ &= \varepsilon \varepsilon_0 \frac{(2\varepsilon_0^2 - 1)}{(\varepsilon_0^2 + \varepsilon_0 - 1)^2} \left(\frac{\varepsilon_0^2 + \varepsilon_0 - 1}{\varepsilon^2 + \varepsilon - 1} \right)^{3/2} \times \\ &\times \left[\left(\frac{2\varepsilon_0 + 1 + \sqrt{5}}{2\varepsilon_0 + 1 - \sqrt{5}} \right) \left(\frac{2\varepsilon + 1 - \sqrt{5}}{2\varepsilon + 1 + \sqrt{5}} \right) \right]^{3/(2\sqrt{5})}, \end{aligned} \quad (23)$$

$$\begin{aligned} \langle \rho^2(\varepsilon) \rangle &= \Sigma \Sigma_{tr} \langle r^2(E) \rangle = \\ &= \frac{4\varepsilon_0^2}{(\varepsilon_0^2 + \varepsilon_0 - 1)} + 2 \ln \left(\frac{\varepsilon_0^2 + \varepsilon_0 - 1}{\varepsilon^2 + \varepsilon - 1} \right) + \\ &+ \frac{6}{5} \left(\frac{4\varepsilon_0 - 3}{\varepsilon_0^2 + \varepsilon_0 - 1} - \frac{4\varepsilon - 3}{\varepsilon^2 + \varepsilon - 1} \right) - \\ &- \frac{16}{5\sqrt{5}} \ln \left[\left(\frac{2\varepsilon_0 + 1 - \sqrt{5}}{2\varepsilon_0 + 1 + \sqrt{5}} \right) \left(\frac{2\varepsilon + 1 + \sqrt{5}}{2\varepsilon + 1 - \sqrt{5}} \right) \right], \end{aligned} \quad (24)$$

где $\varepsilon = E/\varepsilon_d$ и $\varepsilon_0 = E_0/\varepsilon_d$.

С учетом сказанного выше окончательное выражение для пространственно-энергетического распределения полной плотности столкновений каскада движущихся атомов, испущенных импульсным источником (см. (10), (16)), можно представить в следующем безразмерном виде (см. (18), (21)):

$$\begin{aligned} \Psi'_0(\varepsilon, \rho) &= \Psi_0(E, \mathbf{r}) \frac{E_0}{N_0} \left(\frac{1}{\Sigma \Sigma_{tr}} \right)^{3/2} = \\ &= \Psi'(\varepsilon) \left[\frac{3}{2\pi \langle \rho^2(\varepsilon) \rangle} \right]^{3/2} \exp \left[-\frac{3\rho^2}{2\langle \rho^2(\varepsilon) \rangle} \right], \end{aligned} \quad (25)$$

где $\rho = r\sqrt{\Sigma \Sigma_{tr}}$, а функции $\Psi'(\varepsilon)$ и $\langle \rho^2(\varepsilon) \rangle$ определяются выражениями (23), (24).

Выражение (25) можно трактовать и несколько иначе. Положив в уравнении (12) $s = 0$, получим, что оно описывает пространственно-энергетическое распределение плотности столкновений каскада движущихся атомов, испускаемых стационарным точечным моноэнергетическим источником (в этом случае N_0 — число ПВА, испускаемых в единицу времени).

Пространственное распределение плотности вакансий, образовавшихся при распространении каскада движущихся атомов от импульсного источника, очевидно имеет следующий вид:

$$n_v(r) = \int_{\varepsilon_d}^{E_0} dE p(E) \Psi_0(E, \mathbf{r}). \quad (26)$$

Используя выражение (25), эту величину можно представить в следующем безразмерном виде:

$$\begin{aligned} n'_v(\rho) &= n_v(r) \frac{1}{N_0} \left(\frac{1}{\Sigma \Sigma_{tr}} \right)^{3/2} = \varepsilon_0 \int_1^{\varepsilon_0} d\varepsilon \left(1 - \frac{1}{\varepsilon} \right) \Psi'(\varepsilon) \times \\ &\times \left[\frac{3}{2\pi \langle \rho^2(\varepsilon) \rangle} \right]^{3/2} \exp \left[-\frac{3\rho^2}{2\langle \rho^2(\varepsilon) \rangle} \right]. \end{aligned} \quad (27)$$

4. АНАЛИЗ ПОЛУЧЕННОГО РЕШЕНИЯ

Проанализируем полученные результаты. На рис. 1 приведен график функции $\Psi'(\varepsilon)$, построенный по формуле (23) (см. кривую 1). Кроме того, что она является нормирующим множителем в выражении (25), эта функция представляет самостоятельный интерес. Она описывает энергетическое распределение каскада выбитых атомов, распространяющихся от однородно распределенного в пространстве стационарного моноэнергетического источника ПВА (см. (12) при $s = 0$ и $k = 0$). Кривой 2 на этом рисунке представлен график той же функции при $\varepsilon_d = 0$:

$$[\Psi'(\varepsilon)]_{\varepsilon_d=0} = 2\varepsilon_0^2/\varepsilon^2. \quad (28)$$

Видно, что учет энергии связи приводит к более медленному росту функции при $\varepsilon \rightarrow 1$, что обусловлено учетом потерь энергии на выбивание атомов из узлов решетки. Расчеты, представленные на рис. 1, проводились при $\varepsilon_0 = 10^4$.

На рис. 2 кривой 1 представлен график зависимости от энергии среднего квадрата длины замедления, построенный по формуле (24). Кривой 2 здесь представлена та же зависимость при $\varepsilon_d = 0$:

$$[\langle \rho^2(\varepsilon) \rangle]_{\varepsilon_d=0} = 4 + 4 \ln(\varepsilon_0/\varepsilon). \quad (29)$$

Видно, что учет энергии связи приводит к меньшим значениям величины $\langle \rho^2(\varepsilon) \rangle$ при энергиях ε , близких к единице. Здесь так же полагалось, что $\varepsilon_0 = 10^4$.

Проинтегрировав функцию (27) по всему пространству, мы, очевидно, получим выражение для каскадной функции (см. в [22] формулы (29)–(31)):

$$4\pi \int_0^\infty d\rho \rho^2 n'_v(\rho) = \varepsilon_0 \int_1^{\varepsilon_0} d\varepsilon \left(1 - \frac{1}{\varepsilon} \right) \Psi'(\varepsilon) = \nu(\varepsilon_0). \quad (30)$$

В таком случае функция $\tilde{n}_v(\rho) = n'_v(\rho)/\nu(\varepsilon_0)$ представляет собой относительное распределение в пространстве плотности вакансий. Графики простран-

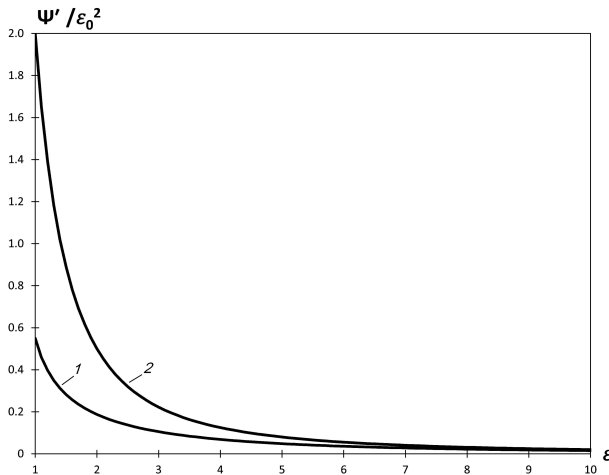


Рис. 1. Зависимость функции $\Psi'(\epsilon)$ от энергии при $\epsilon_0 = 10^4$ (кривая 1 — $\epsilon_d \neq 0$, кривая 2 — $\epsilon_d = 0$)

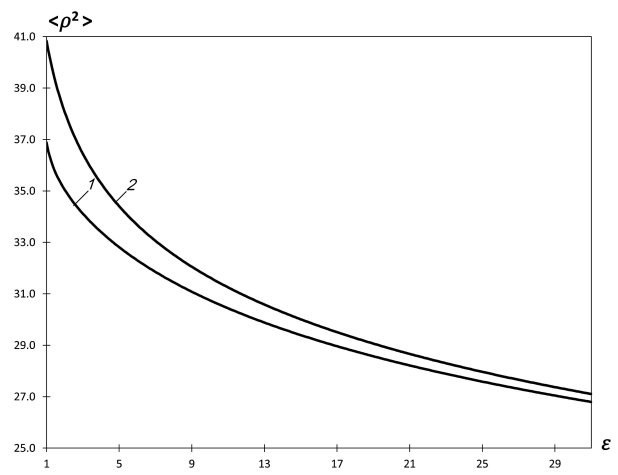


Рис. 2. Зависимость среднего квадрата длины замедления от энергии $\epsilon_0 = 10^4$ (кривая 1 — $\epsilon_d \neq 0$, кривая 2 — $\epsilon_d = 0$)

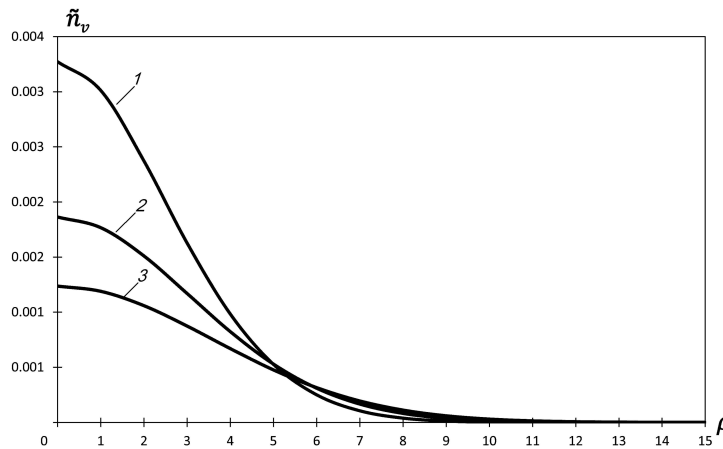


Рис. 3. Пространственное распределение относительной плотности вакансий при $\epsilon_0 = 10^3$ (кривая 1); $\epsilon_0 = 10^4$ (кривая 2); $\epsilon_0 = 10^5$ (кривая 3)

ственного распределения этой функции при различных значениях ϵ_0 представлены на рис. 3. Из приведенных результатов следует, что с увеличением начальной энергии ПВА образование вакансий интенсивнее происходит на больших расстояниях от источника, что обусловлено соответствующим ростом среднего квадрата длины замедления.

5. ВЫВОДЫ

В работе рассматривается развитие каскада выбитых атомов в твердом теле, состоящем из одинаковых атомов. Рассеяние атомов предполагается упругим и сферически-симметричным в системе центра

инерции, а сечение рассеяния считается постоянным.

На основе решения модельного кинетического уравнения Больцмана проанализировано образование вакансий в каскаде движущихся атомов от импульсного, точечного, моноэнергетического источников ПВА. Для пространственного распределения вакансий, образовавшихся при развитии каскада, получено простое безразмерное выражение (27), зависящее от единственного безразмерного параметра ϵ_0 .

Показано, что с ростом этого параметра происходит перемещение относительного числа образующихся вакансий на большие расстояния от

источника (см. рис. 3). Это обстоятельство обусловлено ростом величины среднего квадрата длины замедления с увеличением ε_0 (см. (24), (29)).

Полученное в работе решение кинетического уравнения также позволяет получить выражения для функции распределения движущихся атомов от стационарного, моноэнергетического равномерно распределенного по пространству (см. (23)) и точечного (см. (24)) источников.

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. К. Nordlund, A. E. Sand, F. Granberg et al., J. Nucl. Mater. **512**, 450 (2018).
7. К. Nordlund, J. Nucl. Mater. **520**, 273 (2019).
8. К. Arakawa, Z. Bergstrom, B. D. Wirth et al., J. Nucl. Mater. **554**, 153113 (2021).
9. А. И. Рязанов, Е. В. Метелкин, Препринт ИАЭ-3223 (1979).
10. А. I. Ryazanov, and E. V. Metelkin, Rad. Effects **52**, 15 (1980).
11. Y. Sato, S. Kojimo, T. Yoshiie, et al., J. Nucl. Mater., **179-181**, 901 (1991).
12. Y. Sato, T. Yoshiie, and M. Kiritani, J. Nucl. Mater., **191-194**, 1101 (1992).
13. Е. В. Метелкин, А. И. Рязанов, Атомная энергия **83**, 183 (1997).
14. Е. В. Метелкин, А. И. Рязанов, Е. В. Семенов, ЖЭТФ **134**, 469 (2008).
15. А. I. Ryazanov, E. V. Metelkin, E. V. Semenov, J. Nucl. Mater. **386-388**, 132 (2009).
16. А. А. Aleksandrov, V. A. Akatev, E. V. Metelkin, E. J. Barycheva, Herald of the Bauman Moscow State Technical University, Series Natural Sciences, n. 1, 27 (2019).
17. J. Lindhard, V. Nielsen, and M. Scharff, Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk. **36**, 1 (1968).
18. А. А. Aleksandrov, V. A. Akatev, E. V. Metelkin, E. J. Barycheva, Herald of the Bauman Moscow State Technical University, Series Natural Sciences, n. 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. Е. В. Метелкин, М. В. Лебедева, ФММ **122**, 446 (2021).
22. Е. В. Метелкин, М. В. Лебедева, ЖЭТФ **160**, 167 (2021).
23. А. И. Исаков, М. В. Казарновский, Ю. А. Медведев и др., *Нестационарное замедление нейтронов. Основные закономерности и некоторые приложения*, Наука, Москва (1984).