

Содержание

Предисловие редактора перевода	13
Литература	17
Предисловие	18
Введение	20

Глава 1

Процессы радиационных повреждений	26
1.1. Взаимодействия нейтронов с атомными ядрами.....	28
1.1.1. Упругое рассеяние.....	28
1.1.2. Неупругое рассеяние.....	36
1.1.3. Реакции ($n, 2n$).....	38
1.1.4. Реакции (n, γ).....	40
1.2. Взаимодействие между ионами и атомами.....	42
1.2.1. Межатомные потенциалы.....	42
1.2.2. Кинематика столкновений.....	50
1.3. Ионизация при столкновениях.....	72
1.3.1. Теория потери энергии.....	72
1.3.2. Диапазон вычислений.....	86
Обзор главы.....	93
Обозначения.....	94
Задачи.....	97
Литература.....	102

Глава 2

Смещение атомов	103
2.1. Элементарная теория смещений.....	103
2.1.1. Вероятность смещений.....	104
2.1.2. Модель смещений атомов Кинчина и Пизе.....	106
2.1.3. Энергия смещения.....	109
2.1.4. Предел потери энергии электронов.....	115
2.2. Модификация модели смещения Кинчина — Пизе.....	118
2.2.1. Соображения о компенсации энергии E_d	118
2.2.2. Реальные поперечные сечения передачи энергии.....	118
2.2.3. Потеря энергии при возбуждении электронов.....	120
2.2.4. Влияние кристаллической структуры.....	124
2.3. Поперечное сечение смещения.....	140
2.3.1. Упругое рассеяние.....	140
2.3.2. Неупругое рассеяние.....	141
2.3.3. ($n, 2n$)- и (n, γ)-смещения.....	142

2.3.4. Модификации к модели К-Р и полному поперечному сечению смещения.....	143
2.4. Скорости смещения.....	145
2.5. Изменения свойств от дозы облучения.....	148
2.6. Смещения при облучении заряженными частицами.....	150
Обозначения.....	154
Задачи.....	157
Литература.....	160

Глава 3

Каскадные повреждения.....	162
3.1. Средний свободный путь смещения.....	162
3.2. Первичный спектр энергий атомов отдачи.....	164
3.3. Каскадная энергия повреждения и объем каскада.....	170
3.4. Компьютерное моделирование радиационных повреждений.....	171
3.4.1. Приближенный метод двойных столкновений (МДС).....	172
3.4.2. Метод молекулярной динамики (МД).....	176
3.4.3. Кинетический метод Монте-Карло (КМС).....	179
3.5. Стадии каскадного развития.....	180
3.6. Поведение дефектов в каскаде.....	184
Обозначения.....	194
Задачи.....	196
Литература.....	196

Глава 4

Образование точечных дефектов и диффузия.....	198
4.1. Свойства радиационно-индуцированных дефектов.....	198
4.1.1. Межузельные атомы.....	199
4.1.2. Дефекты внедрения межузельных атомов скопления.....	204
4.1.3. Комплексы межузельных атомов с примесями.....	205
4.1.4. Вакансии.....	206
4.1.5. Скопления вакансий.....	207
4.1.6. Кластеры растворенных и примесных атомов.....	207
4.2. Термодинамика формирования точечных дефектов.....	207
4.3. Диффузия точечных дефектов.....	212
4.3.1. Макроскопическое описание диффузии.....	213
4.3.2. Механизмы диффузии.....	214
4.3.3. Микроскопическое описание диффузии.....	217
4.3.4. Частота перескока Γ	220
4.3.5. Частота перескока ω	221
4.3.6. Уравнения для D.....	222

4.4. Коррелированная диффузия.....	226
4.5. Диффузия в многокомпонентных системах.....	229
4.6. Диффузия вдоль траекторий высокой диффузионной подвижности.....	230
Обозначения.....	234
Задачи.....	236
Литература.....	237

Глава 5

Радиационно-ускоренная диффузия и теория скоростей

взаимодействия дефектов.....	239
5.1. Уравнения баланса точечных дефектов.....	240
5.1.1. Случай 1: низкая температура, низкая плотность стоков.....	243
5.1.2. Случай 2: низкая температура, промежуточная плотность стоков.....	246
5.1.3. Случай 3: низкая температура, высокая плотность стоков.....	246
5.1.4. Случай 4: высокая температура.....	249
5.1.5. Свойства точечных дефектов в уравнениях баланса.....	252
5.1.6. Недостатки простой модели баланса точечных дефектов.....	253
5.2. Радиационно-ускоренная диффузия.....	254
5.3. Взаимодействие дефектов.....	258
5.3.1. Образование радиационных дефектов.....	262
5.3.2. Рекомбинация.....	262
5.3.3. Потери на стоках.....	263
5.3.4. Мощность стоков.....	263
5.4. Контролируемые процессы скорости реакции.....	264
5.4.1. Взаимодействие дефектов с порами.....	264
5.4.2. Взаимодействие дислокаций с радиационными дефектами.....	264
5.5. Реакции, ограниченные диффузией.....	265
5.5.1. Взаимодействие дефектов с порами.....	266
5.5.2. Взаимодействие радиационных дефектов с дислокациями.....	269
5.6. Контроль скорости смешивания.....	271
5.7. Взаимодействие радиационных дефектов с границами зерен.....	272
5.8. Когерентные выделения и легирующие элементы (растворенные элементы).....	274
Обозначения.....	276
Задачи.....	278
Литература.....	283

Глава 6

Радиационно-индуцированные сегрегации	284
6.1. RIS в концентрированных бинарных сплавах	287
6.1.1. Решение системы дифференциальных уравнений в частных производных	293
6.1.2. Связи межузельных атомов	294
6.1.3. Влияние размера растворенных атомов	296
6.1.4. Влияние температуры	299
6.1.5. Влияние скорости дозы	301
6.2. Радиационно-индуцированные сегрегации в тройных сплавах	302
6.3. Влияние локальных изменений состава на RIS	307
6.4. Влияние растворенных элементов на СОС	312
6.5. Примеры СОС в аустенитных сплавах	316
6.6. RIS в ферритных сплавах	318
Обозначения	322
Задачи	324
Литература	325

Глава 7

Микроструктура дислокаций	327
7.1. Дислокационные линии	327
7.1.1. Движение дислокации	332
7.1.2. Описание дислокаций	335
7.1.3. Перемещения, деформации и напряжения	338
7.1.4. Энергия дислокации	341
7.1.5. Натяжение линии дислокации	343
7.1.6. Силы, действующие на дислокацию	347
7.1.7. Взаимодействие между дислокациями	352
7.1.8. Расщепленные дислокации	355
7.1.9. Перегибы и ступеньки	357
7.2. Дефектные петли и тетраэдры дефектов упаковки	359
7.3. Кластеры дефектов	362
7.3.1. Доля дефектов, формирующих кластеры	362
7.3.2. Типы кластеров	365
7.3.3. Подвижность кластеров	369
7.4. Разнесенные радиационные дефекты	373
7.5. Эффективность образования радиационных дефектов	377
7.6. Зарождение и рост дислокационных петель	380
7.6.2. Теория образования кластеров	387
7.6.3. Предпочтение при зарождении кластеров	390

7.7. Рост дислокационной петли.....	395
7.8. Возврат.....	400
7.9. Эволюция микроструктуры межзельных петель.....	403
Обозначения.....	407
Задачи.....	410
Литература.....	413

Глава 8

Радиационно-индуцированные поры и пузыри.....	416
8.1. Зарождение пор.....	417
8.1.1. Равновесное распределение пор по размерам.....	418
8.1.2. Скорость образования пор.....	421
8.1.3. Влияние инертного газа.....	431
8.1.4. Предпочтительное зарождение пор.....	438
8.2. Рост пор.....	441
8.2.1. Скорости поглощения радиационных дефектов и концентрации на поверхностях стока.....	443
8.2.2. Балансы точечных дефектов.....	448
8.3. Уравнение роста поры.....	449
8.3.1. Температурная зависимость.....	455
8.3.2. Зависимость от дозы.....	459
8.3.3. Роль дислокаций в качестве предпочтительных стоков.....	463
8.3.4. Зависимость от скорости дозы.....	466
8.3.5. Сдвиги переменных при облучении.....	467
8.3.6. Зависимость от напряжений.....	473
8.3.7. Эффект RIS.....	478
8.3.8. Влияние предпочтения при образовании дефектов.....	481
8.3.9. Решетки пор.....	485
8.3.10. Влияние микроструктуры и состава.....	487
8.3.11. Влияние эксплуатационных параметров облучения в реакторе.....	494
8.4. Рост пузырей.....	498
8.4.1. Механика пузырей.....	499
8.4.2. Закон роста.....	502
8.4.3. Рост пузырей вследствие испускания дислокационных петель.....	506
8.4.4. Решетки пузырей.....	507
8.4.5. Образование гелия.....	508
Обозначения.....	509
Задачи.....	513
Литература.....	516

Глава 9

Стабильность фаз под облучением	519
9.1. Радиационно-стимулированные сегрегации и образование выделений.....	519
9.2. Растворение за счет атомов отдачи.....	522
9.3. Радиационное разупорядочение.....	533
9.4. Образование некогерентных выделений.....	540
9.5. Образование когерентных выделений.....	548
9.6. Метастабильные фазы.....	552
9.6.1. Превращение порядок-беспорядок.....	553
9.6.2. Превращения кристаллической структуры.....	554
9.6.3. Образование квазикристаллов.....	556
9.7. Аморфизация.....	557
9.7.1. Теплота формирования соединений и различия кристаллических структур.....	558
9.7.2. Области растворимости в соединениях и критическая плотность дефектов.....	562
9.7.3. Термодинамика и кинетика аморфизации.....	565
9.8. Фазовая стабильность компонентов сплавов активной зоны реактора.....	577
Обозначения.....	581
Задачи.....	585
Литература.....	587

Глава 10

Уникальные эффекты ионного облучения	590
10.1. Методы ионного облучения.....	591
10.2. Изменения состава.....	594
10.2.1. Распыление.....	595
10.2.2. Адсорбция Гиббса.....	603
10.2.3. Имплантация атомов отдачи.....	605
10.2.4. Смешивание в каскаде (изотропное смещение).....	608
10.2.5. Комбинация процессов изменения состава поврежденной поверхности.....	621
10.2.6. Перераспределение ионов во время ионной имплантации.....	626
10.3. Другие эффекты ионной имплантации.....	630
10.3.1. Рост зерна.....	630
10.3.2. Текстура.....	632
10.3.3. Дислокационная микроструктура.....	634

10.4. Газовое нагружение большой дозой: блистеринг и отслаивание.....	637
10.5. Твердые фазы и решетка пузырей инертного газа.....	643
Обозначения.....	644
Задачи.....	647
Литература.....	650

Глава 11

Моделирование влияния нейтронного облучения посредством облучения ионами.....

654

11.1. Мотивация использования ионного облучения взамен нейтронного облучения.....	654
11.2. Обзор аспектов радиационных повреждений, полученных посредством ионного облучения.....	657
11.3. Зависимость RIS от типа частиц.....	661
11.4. Преимущества и недостатки при использовании различных типов частиц.....	669
11.4.1. Электроны.....	672
11.4.2. Тяжелые ионы.....	674
11.4.3. Протоны.....	677
11.5. Радиационные параметры облучения частицами.....	679
11.6. Имитация нейтронного повреждения посредством облучения протонами.....	682
Обозначения.....	689
Задачи.....	690
Литература.....	691

Глава 12

Радиационное упрочнение и деформация.....

693

12.1. Упругая и пластическая деформация.....	694
12.1.1. Упругость.....	694
12.1.2. Пластичность.....	700
12.1.3. Испытание на растяжение.....	702
12.1.4. Предел текучести.....	707
12.2. Радиационное упрочнение.....	709
12.2.1. Источники упрочнения.....	709
12.2.2. Тормозное упрочнение (упрочнение при трении).....	713
12.2.3. Суперпозиция механизмов упрочнения.....	724
12.2.4. Упрочнение поликристаллов.....	731
12.2.5. Насыщение радиационного упрочнения.....	733

12.2.6. Сравнение расчетных значений упрочнения с данными измерений	737
12.2.7. Радиационное упрочнение при отжиге	742
12.2.8. Корреляция между твердостью и пределом текучести	743
12.3. Деформация облученных металлов	747
12.3.1. Карты механизмов деформации	750
12.3.2. Локализованная деформация	754
Обозначения	759
Задачи	762
Литература	765

Глава 13

Разрушение и охрупчивание	769
13.1. Виды разрушения	770
13.2. Когезионная прочность металлов	770
13.3. Механика разрушения	774
13.4. Испытания в механике разрушения	781
13.5. Механика упруго-пластичного разрушения	783
13.6. Хрупкое разрушение	786
13.7. Радиационно-индуцированное охрупчивание ферритных сталей	794
13.7.1. Ударные испытания надрезанных образцов	794
13.7.2. ДВТГ и снижение энергии верхней полки	798
13.7.3. Метод образований кривой	800
13.7.4. Факторы, влияющие на охрупчивание	805
13.7.5. Хрупкость ферритно-мартенситных сталей	811
13.7.6. Отжиг и повторное облучение	813
13.7.7. Усталость	815
13.8. Разрушение и усталость аустенитных сплавов при низких и промежуточных температурах	820
13.8.1. Влияние облучения на вязкость разрушения	820
13.8.2. Влияние облучения на усталость	824
13.9. Высокотемпературное охрупчивание	826
13.9.1. Поры по границам зерен и пузыри	828
13.9.2. Скольжение по границам зерен	833
13.9.3. Рост трещин по границам зерен	836
13.9.4. Карты механизмов разрушения	839
Обозначения	840
Задачи	842
Литература	845

Глава 14

Радиационная ползучесть и рост	848
14.1. Тепловая ползучесть.....	849
14.1.1. Дислокационная ползучесть.....	854
14.1.2. Диффузионная ползучесть.....	862
14.2. Радиационная ползучесть.....	865
14.2.1. Стимулированное напряжением предпочтительное зарождение петель (SIPN).....	866
14.2.2. Стимулированное напряжением предпочтительное поглощение (SIPA).....	870
14.2.3. Восхождение и скольжение за счет предпочтительного поглощения (PAG).....	872
14.2.4. Восхождение и скольжение за счет дислокационного предпочтения.....	875
14.2.5. Неустановившаяся ползучесть.....	877
14.2.6. Перестройка петель.....	881
14.2.7. Ползучесть при возврате.....	883
14.2.8. Диффузионная ползучесть: почему отсутствует влияние облучения?.....	884
14.2.9. Сравнение теории с данными по ползучести.....	885
14.2.10. Модифицированная облучением карта механизмов деформации.....	891
14.3. Радиационный рост и ползучесть сплавов циркония.....	892
14.3.1. Микроструктура облученных сплавов циркония.....	894
14.3.2. Радиационный рост.....	896
14.3.3. Радиационная ползучесть.....	900
Обозначения.....	904
Задачи.....	907
Литература.....	910

Глава 15

Растрескивание облученных металлов и сплавов в коррозионной среде	913
15.1. Коррозионное растрескивание под напряжением: обучающая программа.....	916
15.1.1. Испытания SCC.....	919
15.1.2. Процессы SCC.....	922
15.1.3. Металлургические условия.....	924
15.1.4. Возникновение и распространение трещины.....	926
15.1.5. Механизмы коррозионного растрескивания под напряжением.....	934
15.1.6. Модель распространения трещины.....	938

15.1.7. Механические модели разрушения.....	941
15.1.8. Коррозионная усталость.....	942
15.1.9. Водородное охрупчивание.....	943
15.2. Влияние облучения на химию воды.....	945
15.2.1. Радиолиз и его влияние на потенциал коррозии.....	945
15.2.2. Влияние потенциала коррозии на IASCC.....	948
15.3. Эксплуатационные и лабораторные наблюдения за влиянием облучения на SCC.....	951
15.3.1. Аустенитные сплавы.....	951
15.3.2. Ферритные сплавы.....	958
15.4. Механизмы IASCC.....	961
15.4.1. Снижение хрома на границах зерен.....	961
15.4.2. Радиационное упрочнение.....	962
15.4.3. Режим деформации.....	963
15.4.4. Селективное внутреннее окисление.....	965
15.4.5. Радиационно-индуцированная ползучесть.....	966
Обозначения.....	967
Задачи.....	969
Литература.....	969
Предметный указатель.....	974

Предисловие редактора перевода

Элементы конструкций ядерных энергетических установок различного функционального назначения работают в условиях облучения. Это сопровождается изменением теплофизических, упругих и прочностных характеристик конструкционных материалов. Повреждаемость материала в условиях нейтронного облучения определяет ресурс и безопасность эксплуатации основных узлов ядерной техники. Поэтому возникает необходимость в изучении физических механизмов взаимодействия нейтронного облучения с металлами и сплавами. Понимание физических основ протекающих процессов позволит полнее использовать имеющиеся материалы и наметить пути получения принципиально новых материалов для удовлетворения все возрастающих потребностей ядерной техники. Отдельным аспектом взаимодействия нейтронов и заряженных частиц с металлами посвящены многочисленные публикации. Они, как правило, рассматривают конкретные вопросы того или иного направления исследований и не претендуют на полноту представления. Отсюда с очевидностью вытекает необходимость обобщения теоретических моделей и экспериментальных результатов по радиационному повреждению конструкционных материалов. Такое обобщение с исчерпывающей полнотой представлено в предлагаемой монографии. Она посвящена вопросам радиационного материаловедения металлов и сплавов. Далее кратко затронем неоспоримые достоинства предлагаемого издания монографии на русском языке при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (РФФИ).

Хорошо известно, что уровень развития любой технической цивилизации определяется используемыми материалами. Они должны в полной мере отвечать эксплуатационным потребностям новой техники. Использование ядерной энергии для обеспечения современной технической цивилизации вплотную поставило вопрос о поведении известных материалов в условиях облучения. Этому направлению исследований в полной мере отвечает новое материаловедческое направление под названием «радиационное материаловедение металлов и сплавов». Несомненным достоинством монографии под таким названием является исчерпывающая полнота изложения в сочетании с детальными подробностями. Единый подход к рассматриваемым вопросам содержит в своей основе основные законы физики. Это лишний раз свидетельствует о единстве всех природных явлений, которые подчиняются известным физическим законо-

мерностям. С этих позиций радиационное поведение металлов и сплавов органически вписывается в общефизические процессы. Отсюда непосредственно следует физическая прозрачность радиационных явлений, поскольку они по большому счету подчиняются лишь незначительному набору физических законов (например, законы сохранения).

Если исключить мелкие детали различных ответвлений, то основу взаимодействия нейтронного облучения металлов составляет образование радиационных точечных дефектов: вакансий и межузельных атомов. Они получили название пар Френкеля, так как образуются и исчезают при аннигиляции парами. Радиационные точечные дефекты ничем не отличаются от обычных точечных дефектов металлов и сплавов. В самом деле, металл «не знает», что именно привело его к образованию точечных дефектов: то ли силовая, то ли радиационная нагрузка. Разумеется, для металла при нейтронном облучении явилось полной неожиданностью образование каскада точечных дефектов за весьма короткое время по сравнению с традиционными внешними воздействиями (силовыми или температурными). Однако образованные при нейтронном облучении точечные дефекты никоим образом не отличаются от соответствующих точечных дефектов металла. Поэтому они также взаимодействуют с другими несовершенствами металла (например, с краевыми дислокациями или клиновыми дисклинациями). Другими словами, структурные несовершенства металла не различают точечные дефекты в зависимости от их происхождения. Единое описание всего многообразия точечных дефектов прослеживается на протяжении всей монографии при рассмотрении самых разнообразных процессов радиационной повреждаемости металла. Естественно, для радиационных точечных дефектов можно выделить некоторые характерные особенности. К ним относятся, прежде всего, образование в равных количествах вакансий и межузельных атомов неравновесной концентрации. Известно, что каждой температуре соответствует своя равновесная концентрация вакансий и межузельных атомов. При этом концентрация последних существенно ниже по сравнению с вакансиями из-за более высокой энергии образования межузельного атома в обычных условиях, то есть без облучения. При понижении температуры возникает неравновесная концентрация вакансий, заведомо превышающая концентрацию межузельных атомов. Неравновесные вакансии диффузионно мигрируют на стоки практически без аннигиляции с межузельными атомами, которых весьма мало. Диффузионная миграция радиационных точечных дефектов сопровождается их аннигиляцией,

поскольку противоположные дефекты образуются в равных количествах (пары Френкеля).

Все процессы радиационного повреждения металлов и сплавов на их основе описываются в континуальном приближении. Это означает, что концентрация точечных дефектов является непрерывной функцией координат. В таком же приближении рассматриваются и процессы диффузионной миграции точечных дефектов на различные стоки. При описании кинетических закономерностей применяют уравнения в частных производных параболического типа или уравнения первого порядка по аналогии с химическими реакциями. В последнем случае скорость изменения концентрации точечных дефектов прямо пропорциональна первой степени концентрации. Следует отметить еще одну особенность при образовании радиационных точечных дефектов. Для их описания вводится понятие «число смещений на атом» (сна), которое достаточно устойчиво присутствует в радиационном материаловедении. Между тем эта характеристика определяет всего лишь безразмерную концентрацию пар Френкеля. Радиационные точечные дефекты мигрируют на стоки вследствие упругого взаимодействия с другими несовершенствами металла. Такое взаимодействие обусловлено наличием полей внутренних напряжений в окрестности структурных дефектов металла. Их описание осуществляют также в континуальном приближении с использованием математических моделей механики сплошной среды. Привлекательность использования континуального приближения заключается в том, что для количественного описания процессов радиационного повреждения металлов можно применять хорошо разработанные и освоенные уравнения математической физики.

Для описания радиационной повреждаемости металлов и сплавов при нейтронном облучении использованы достаточно простые и вместе с тем ясные с физической точки зрения модели. Такие модели позволяют получать аналитические зависимости с набором физически обоснованных постоянных. Хорошо известно, что аналитические методы решения задач по своей образности и емкости находятся вне конкуренции по сравнению с другими методами (например, численными или экспериментальными). Аналитические соотношения на простых моделях дают возможность оценить предельные возможности конструктивной схемы, свойств материала и эксплуатационных параметров. На протяжении всего содержания монографии превалируют именно аналитические методы решения соответствующих задач. Это позволяет достаточно зримо пред-

ставить физическую сущность процесса и возможные направления его протекания. Применение численных методов (например, метод молекулярной динамики) используется исключительно для более полного описания радиационной повреждаемости металла на начальном этапе облучения (например, образование каскада точечных дефектов). Значительно полнее представлены экспериментальные результаты. Они неукоснительно сопровождают математические модели протекающих процессов, что лишним раз подчеркивает правомочность используемых физических моделей.

Следует отметить безупречно стройную логику построения монографии. Она состоит из трех самостоятельных, но взаимосвязанных частей. Первая часть монографии посвящена физическим процессам радиационного повреждения металлов и сплавов при облучении. Логическим продолжением первой части является исследование влияния облучения на физические характеристики металлов и сплавов в широком смысле этого слова. И, наконец, третья часть монографии достаточно подробно затрагивает влияние радиационных повреждений на механические и прочностные свойства металлов. По мере перехода от одной части монографии к другой содержание приобретает практическую направленность. В поле зрения читателя монографии оказываются многие вопросы, с которыми исследователи соприкасаются при длительной эксплуатации элементов конструкций ядерной техники. Каждая часть монографии состоит из отдельных глав, между которыми также прослеживается внутренняя связь. При этом в каждой главе монографии содержится необходимый набор сведений для понимания содержания и проведения математических преобразований. Поэтому каждую главу монографии можно изучать, не обращаясь к содержанию остальных глав. Все математические преобразования выполнены с особой тщательностью вплоть до тривиальных подробностей. Это существенно облегчает решение предложенных задач, которые имеются в каждой главе монографии.

Содержание монографии представляет несомненный интерес для специалистов в области радиационного материаловедения. Студенты, аспиранты и преподаватели могут воспользоваться конкретными научными результатами, а также методическим подходом при построении математических моделей соответствующих процессов.

Н. М. Власов, О. И. Челябинна

Литература

- [1]. А. Дамаск, Дж. Динс. Точечные дефекты в металлах. Пер. с англ. М.: Мир, 1966, 288с.
- [2]. Дж. Маннинд. Кинетика диффузии атомов в кристаллах. Пер. с англ. М.: Мир, 1971, 271 с.
- [3]. Дж. Хирт, И. Лоте. Теория дислокаций. Пер. с англ. М.: Атомиздат, 1972, 583 с.
- [4]. М. Томпсон. Дефекты и радиационные повреждения в металлах. Пер. с англ. М.: Мир, 1971, 364 с.
- [5]. С. П. Тимошенко, Дж. Гудьер. Теория упругости. Пер. с англ. М.: Наука, 1979, 554с.
- [6]. Фазовые превращения при облучении. Пер. с англ. Челябинск, Металлургия, 1989, 303 с.
- [7]. Н. М. Власов, И. И. Федик. Тепловыделяющие элементы ядерных ракетных двигателей. М.: ЦНИИАтоминформ, 2001, 205 с.
- [8]. Ю. Г. Драгунов, Н. М. Власов, С. Д. Иванов, И. И. Федик. Самоуравновешенные внутренние напряжения. М.: МГОУ, 2010, 357 с.
- [9]. К. Теодосиу. Упругие модели дефектов в кристаллах. Пер. с англ. М.: Мир, 1985, 351 с.
- [10]. Р.А. Андриевский. А. М. Глезер, Прочность наноструктур. УФН, 2009, т. 179, № 4, с. 338—358.
- [11]. Р.А. Андриевский. Влияние облучения на свойства наноматериалов. ФММ, 2010, т. 110, № 3, с. 243—252.
- [12]. Й. Чадек. Ползучесть металлических материалов. Пер. с чешского. М.: Мир, 1987, 302 с.
- [13]. Н. М. Власов, А. В. Звягинцева. Математическое моделирование водородной проницаемости металлов. Воронеж, ВГТУ, 2012, 247 с.
- [14]. Челябинина О. И. Термонапряженное состояние сферической оболочки с неоднородным коэффициентом теплопроводности. // Проблемы машиностроения и автоматизации. 2014. № 1. С. 131—135.

Предисловие

Задача монографии заключается в изложении основ радиационной теории и механизмов влияния облучения на металлы и сплавы. Весь текст разделен на три части, каждая из которых включает отдельные главы, представляющие объединенную картину влияния облучения на изменение структуры и свойств металлических материалов. Первая часть состоит из трех глав, где изложены сведения о процессах радиационного повреждения и математическом аппарате для количественной оценки пространственной структуры повреждений. В главе 1 рассматриваются передача энергии и взаимодействие между налетающими частицами и атомами вещества. Глава 2 посвящена определению числа смещений атомов при облучении частицами, а в главе 3 описываются пространственные конфигурации образующихся дефектов. В то время как радиационные повреждения характеризуют состояние облученного материала, радиационное влияние определяется поведением дефектов после их формирования в материале. Во второй части (главы 4—11) рассмотрены последствия влияния облучения на физические характеристики металлов. В главе 4 дана оценка равновесной концентрации точечных дефектов и описано их влияние на диффузию. В главе 5 обсуждаются взаимодействия между точечными дефектами и диффузия дефектов под облучением, определяющие радиационное поведение. В главе 6 описываются явления сегрегации, вызванные ускоренной диффузией атомов под облучением. Главы 7 и 8 обращаются к явлениям образования дислокаций, росту дислокационных петель и пор-дефектов, определяющих особенности поведения облучаемых сплавов. Глава 9 посвящена стабильности индуцированных облучением фаз, выпадением частиц и их растворением. В главе 10 обсуждается влияние облучения ионами на изменение состава за счет распыления, расслаивания и т. д. Наконец, в главе 11 описывается моделирование нейтронного облучения путем облучения ионами. Влияние радиационных повреждений на механические свойства (часть III) отличается от воздействия на физические свойства появлением напряжений. Упрочнение и деформация сплавов под облучением обсуждаются в главе 12. Влияние облучения на образование и распространение трещин при статическом или усталостном нагружении описано в главе 13. Наконец, ползучесть и рост скорости деформации рассмотрены в главе 14. Облучение также сильно влияет на коррозию и коррозионное растрескивание под напряжением. Возникновение этих явлений может ограничить реализацию многих реакторных проектов. В главе 15 рассматривается комбинированное влияние среды и облучения

на процессы коррозии под напряжениями и коррозионное растрескивание, ухудшающие поведение сплавов. Главы содержат примеры и иллюстрации воздействия радиации, а также расчетные количественные оценки описанных явлений. В конце каждой главы предлагаются вопросы для закрепления главных понятий, вызывающих у читателя интерес к затронутой теме. Текст, примеры, иллюстрации и задачи в конце главы обеспечивают всестороннее обсуждение радиационных явлений в металлах и сплавах. Многие рассматриваемые вопросы опираются на элементарные понятия термодинамики и металловедения. Сведения о кристаллической структуре, дефектах и дислокациях, упругости и пластичности, деформации и разрушении, коррозии и коррозионном разрушении под напряжением дают основу для понимания радиационных явлений. Книга либо представляет необходимые исходные данные по каждому из этих вопросов, либо предлагает ссылки на другие источники с убедительной трактовкой темы. Эта монография должна быть полезной для ученых, которые хотели бы получить новые сведения про облучение материалов, или студентам, желающим приобрести обобщенное представление о радиационных явлениях. Несмотря на то что главы дополняют друг друга и каждая глава основывается на сумме знаний, изложенных в предыдущих, возможно также чтение выбранной главы только по определенной теме. В качестве последнего замечания автор хотел бы отметить, что монография написана на основе тщательного отбора и обобщения информации из многочисленных журналов и докладов конференций в целях всестороннего охвата процессов радиационного материаловедения. Проведена тщательная работа по выбору надежных ссылок на источники разработок, графиков и таблиц, содержащихся в книге. Автор обязан многим издателям, предоставившим иллюстрации для монографии. Наконец, автор желает выразить благодарность многим коллегам, студентам и друзьям, которые помогли ему советами в этой работе. В частности, особая благодарность выражается Джереми Басби, Тоду Аллену, Майклу Ацмону, Роджеру Столлеру, Юрию Осетски, Яну Робертсону и Брайену Вирсу за их реальный вклад в содержание книги; Элайн Вести, Брайену Вагнеру и Син Лемеху за подготовку иллюстраций; Черелин Дэвису и Овиду Тоадеру за их помощь в подготовке рукописи и кино; Линн Рену, Дону Оландеру, Артуру Мотту, Майклу Настази, Стиву Цинклу, К. Фаллосу Мурти, Лу Мансуру и Питеру Андресену за обзоры глав, Джону Кингу и Арденн Бементи за поддержку автора при выполнении намеченной темы много лет тому назад.

Введение

Радиационное материаловедение, рассматривающее взаимодействие облучения с материалом, представляет широкую отрасль знаний, охватывающую многие источники и виды облучения и материалов. Большая часть наиболее сильных взаимодействий облучения с материалами происходит в активной зоне ядерного реактора, где атомы конструкционных материалов много раз смещаются за эксплуатационное время службы. Последствия воздействия радиации на конструкционные элементы включают: изменения их формы и объема на десятки процентов, увеличение твердости в пять и более раз, серьезное снижение пластичности, повышение хрупкости и снижение коррозионной стойкости материалов в средах. Для сохранения служебных характеристик элементов реактора требуется глубокое понимание влияния облучения на материалы еще на стадии проектирования и учет его либо путем выбора надлежащих эксплуатационных режимов работы реактора, либо за счет создания новых, более стойких к радиации материалов.

Привлекательность ядерной энергетики в настоящее время вызвана большими достижениями в эксплуатации реакторов и четким пониманием радиационной деградации технических систем. Кроме того, будущее развитие ядерной энергетики обусловлено разработанными концепциями безопасности и надежности создаваемых реакторов, предлагаемыми усовершенствованиями переработки радиоактивных отходов, повышением эффективности выработки энергии и снижением издержек производства. Предполагается также, что дешевое производство водорода экологически чистыми процессами в будущем приведет к развитию водородной энергетики. Все это увеличивает затраты, большая часть которых связана с новыми требованиями к материалам при проектировании реакторов. Предполагается, что материалы будут эксплуатироваться в более агрессивных условиях: при более высоких температурах и дозах облучения. В статье журнала «Природа» Батлер [1], рассматривая проблемы создания современных реакторов, считает, что поведение материалов, определяемое специфичной радиационной средой реактора, делает науку радиационного материаловедения главенствующей в мире будущей ядерной энергетики. Именно с учетом этого была сформулирована цель данной монографии, направленная на ясное фундаментальное понимание радиационного воздействия на конструкционные материалы.



Основными конструкционными материалами в реакторных системах являются кристаллические металлические сплавы. Фактически все конструкционные материалы в реакторах являются металлическими и многие из материалов, предлагаемых для использования в современных реакторах при более агрессивных условиях эксплуатации, также являются металлами. Различные виды облучения: ионы, нейтроны, электроны и гамма-лучи — обладают способностью смещать атомы из регулярных положений решетки, что является основополагающей причиной изменения свойств конструкционных материалов. Включение в круг рассмотрения вопросов ионного облучения обусловлено их применением в других областях техники, таких как ускорители для переработки ядерных отходов, или в создании новых материалов за счет использования ионных потоков. Все понятия по взаимодействию ионов с твердыми телами, представленные в этой книге, применимы также к областям радиационных процессов в атомном реакторе.

Влияние облучения на материалы основывается, в первую очередь, на взаимодействии частицы, обладающей определенной энергией, с веществом. Так как это явление обусловлено несколькими этапами и процессами, то первичным является смещение атома из регулярного положения решетки. Поскольку в книге главным образом рассматриваются кристаллические твердые тела, в которых положение атома определяется кристаллической структурой, то облучение вызывает смещение атома из его регулярного положения и приводит к образованию вакансии. Смещенный атом в конечном счете останавливается в промежутке между участками решетки, становясь межузельным атомом. Образование пары «вакансия — межузельный атом» является определяющим событием в проявлении радиации в кристаллических твердых телах и известно под названием «пара Френкеля» (ПФ). Присутствие ПФ и других радиационных повреждений определяет физические свойства, а с появлением напряжений — и механическое поведение материалов при облучении.

Радиационный процесс повреждения, детально рассмотренный в главе 1, заканчивается локализацией смещенного атома, обычно называемого первичным выбитым атомом (ПВА) (primary knock-on atom, РКА), в промежуточном положении кристаллической решетки за время приблизительно 10^{-11} с. Последующие явления, рассматриваемые как физические следствия облучения, включают распухание, рост, фазовые превращения, сегрегации и т. д. Например, кубик чистого никеля с размером каждой грани 1 см после облучения в реакторе (10^{22} н/см²) изменится

до размера 1,06 см на сторону, вызвав изменение объема на 20 %. Изменение объема или набухание протекает изотропно за счет формирования в материале пор (см., например, рис. 8.1). Другой пример — радиационный рост. Цилиндрический урановый образец длиной 10 см и диаметром 1 см после облучения флюенсом 10^{20} н/см² увеличивает длину до 30 см и снижает размер диаметра до 0,58 см, оставляя объем неизменным на уровне 7,85 см³, но при сильном искажении формы образца. Искажение формы образца под облучением при постоянном объеме называют радиационным ростом.

Под облучением также встречаются случаи фазовых превращений. В твердых растворах сплава Ni-12,8at%Al, облученного ионами Ni⁺ с энергией 5 МэВ флюенсом 10^{16} см⁻², формируется отдельная и отличная от родительской фаза Ni₃Al (см., например, рис. 9.3). Формирование новой фазы при облучении, известное как радиационно-индуцированное фазовое превращение, имеет большое значение как при ионных, так и при нейтронных облучениях. Последний пример физических радиационных изменений связан с явлениями сегрегации. Сплав Ni-1at % Si после бомбардировки ионами Ni⁺ при 525 °С и дозе одно смещение на атом (СНА) (displacements per atom, dpa) обогащается атомами Si на поверхности границ зерен в количестве, превышающем содержание в объеме в 20—60 раз (см., например, рис. 6.5). Перераспределение легирующих элементов на отдельных структурных участках известно как радиационно-индуцированные сегрегации.

Вызванные облучением физические изменения действительно могут быть весьма существенными. Но как изменится конструкционная целостность компонентов? Эта сфера радиационного влияния на механическое поведение проявляется только при возникновении напряжений. В этих случаях сплавы ведут себя совсем иначе, чем необлученные образцы. Например, ударная вязкость облученной стали может резко снизиться. Для необлученной стали поглощенная энергия зависит от температуры и, если при низких температурах уровень поглощенной энергии мал и сталь становится хрупкой, то с повышением температуры способность поглощения энергии стальным образцом резко увеличивается. Облучение стали нейтронами может до 5 раз уменьшить деформацию и более чем в 10 раз увеличить прочность. Облучение может также повлиять на изменение деформационной способности материала при высокой температуре. Наблюдается почти полная утрата ползучести из-за сильного охрупчивания материала при облучении. Наконец, облучение нейтрона-

ми флюенсом $>5 \cdot 10^{20}$ н/см² ($E > 1$ МэВ) в легководных реакторах приводит к ускоренному межзеренному растрескиванию железа в аустенитных сплавах на основе никеля. Это явление растрескивания весьма распространено, поскольку оно встречается в большинстве аустенитных сплавов для всех видов водных реакторов. Ясно, что любое из этих повреждений окажет серьезное влияние на целостность конструкционных элементов реактора. Понимание механизмов радиационного воздействия является основой проектирования устойчивых конструкций или разработки новых сплавов, более устойчивых к радиационным воздействиям. Как оказывается, почти все радиационные последствия обусловлены общими, связанными между собой различными дефектами, такими как: изолированные вакансии и межузельные атомы, кластеры вакансий и межузельных атомов, дислокационные линии и петли, поры и пузыри. Читатель должен иметь в виду, что все виды дефектов существенны при переходе от рассмотрения случаев физических повреждений к радиационным механическим последствиям. Сначала обратимся к случаям радиационных повреждений, поскольку они являются основой для понимания всех последствий облучения. Начнем с количественного определения степени радиационного повреждения, то есть количественной оценки числа вакансий и межузельных атомов при столкновении с бомбардирующими частицами и описания развития физического процесса взаимодействия. Не сделав этого, мы не получим возможности понять степень повреждения материала. Важность определения последствий облучения и количественные оценки образующихся дефектов обсуждены подробно в главах 2 и 3, здесь же дана простая иллюстрация.

Число смещений, созданных потоком нейтронов, находится в сложной зависимости от энергии нейтронов. На верхнем рис. В.1 видим, что предел текучести нержавеющей стали 316 находится в заметной зависимости от флюенса нейтронов с индивидуальными спектрами энергий нейтронов [2]. OWR — испытательный реактор с типичным нейтронным спектром легководных реакторов (ЛВР); RTNS-II — источник, производящий чистый поток нейтронов с энергией 14 МэВ, и установка LASREF, обладающая широким спектром нейтронов высоких энергий. Однако при построении зависимости предела текучести сплава от числа смещений (СНА) данные для всех трех видов источников нейтронов легко укладываются на единую кривую (нижний рис. В.1).

Поскольку корреляция предела текучести с флюенсом нейтронов отсутствует, то удобнее представлять последствия влияния облучения

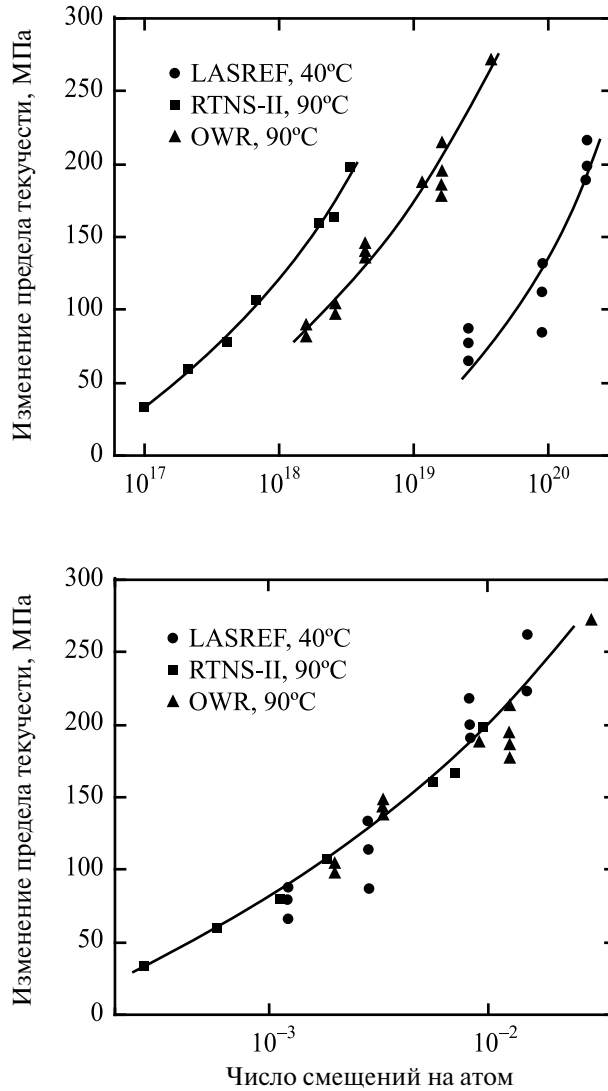


Рис. В.1. Сравнение изменений предела текучести нержавеющей стали 316, облученной источниками с тремя спектрами энергии нейтронов. В то время как корреляция предела текучести с флюенсом нейтронов отсутствует, существует четкая связь между пределом текучести и числом смещений на атом (СНА) (на основе работы [2])

на свойства материалов количественным числом смещений R (СНА) в единице объема за единицу времени ($\text{см}^3/\text{с}$):

$$R = \frac{\text{СНА}}{\text{см}^3 \cdot \text{с}} = N \int_{\hat{E}}^{\check{E}} \phi(E_i) \sigma_D(E_i) dE_i, \quad (\text{В.1})$$

где N — плотность числа атомов, \hat{E} и \check{E} — максимальная и минимальная энергия бомбардирующей частицы, $\phi(E_i)$ — энергия, зависящая от потока частиц, и $\sigma_D(E_i)$ — поперечное сечение смещений, зависящее от энергии

$$\sigma_D(E_i) = \int_{\check{T}}^{\hat{T}} \sigma(E_i, T) v(T) dT, \quad (\text{В.2})$$

где \hat{T} — максимальная энергия, передаваемая при столкновении частицы с энергией E_i атому решетки; \check{T} — минимальная энергия, переданная при столкновении частицы с энергией E_i атому решетки, $\sigma(E_i, T)$ — поперечное сечение столкновения частицы с энергией E_i , приводящее к передаче энергии T к повреждаемому атому; $v(T)$ — число смещений на первичный атом отдачи. Таким образом, в конечном счете мы получаем

$$R = N \int_{\hat{E}}^{\check{E}} \int_{\check{T}}^{\hat{T}} \phi(E_i) \sigma(E_i, T) v(T) dT dE_i. \quad (\text{В.3})$$

Две основные переменные в этом уравнении — $\sigma(E_i, T)$ и $v(T)$. Член $\sigma(E_i, T)$ характеризует передачу энергии от налетающей частицы к первому атому, с которым произошло столкновение в мишени (первичный выбитый атом (ПВА)). Определение $\sigma(E_i, T)$ — основная задача главы 1. Вторая задача заключается в определении $v(T)$ (общего числа смещений), которые ПВА продолжает вызывать в материале. Его определение подробно описано в главе 2. В целом обе задачи приводят к оценке общего числа смещений, вызванных налетающей частицей с энергией E_i , и уравнение (В.3) учитывает распределение энергии этих частиц. В результате получаем общее число смещений в мишени от потока частиц с известным распределением энергии. Мы будем часто возвращаться к этому уравнению, поскольку оно представляет сущность определения радиационных повреждений в твердых телах.

ГЛАВА I

ПРОЦЕССЫ РАДИАЦИОННЫХ ПОВРЕЖДЕНИЙ

Процессы радиационного повреждения обусловлены передачей энергии налетающей частицы кристаллу и результирующим распределением атомов в кристалле после завершения события. Радиационные повреждения включают несколько разных процессов. Эти процессы и порядок их возникновения следующие.

1. Взаимодействие частицы высокой энергии с атомом кристалла.
2. Передача кинетической энергии атому решетки и образование первичного выбитого атома (ПВА).
3. Смещение атома из участка решетки.
4. Перемещение смещенного атома в решетке и создание дополнительных атомов отдачи.
5. Образование каскада смещений (набора точечных дефектов, созданных ПВА).
6. Конечное состояние ПВА в виде межузельного атома.

Радиационные процессы повреждения заканчиваются, когда ПВА останавливается и становится межузельным атомом в решетке. В результате радиационного повреждения создается набор точечных дефектов (вакансий и межузельных атомов) и скоплений этих дефектов в кристаллической решетке. Стоит заметить, что вся эта цепь событий совершается за время приблизительно 10^{-11} с (см. табл. 1.1). Последующие события, вовлекающие перемещение точечных дефектов и их скоплений в кластерные объединения или приводящие к их расслоению, классифицируются как радиационные повреждения.

Чтобы понять и количественно охарактеризовать радиационные повреждения, необходимо прежде всего знать, как описать взаимодействие частиц, вызывающее смещение в кристалле, и затем оценить этот процесс количественно. Самая простая модель основывается на приближенном рассмотрении столкновения твердых сфер с появлением

смещений, когда переданная энергия достаточно высока, чтобы вывести смещаемый атом из регулярного положения в решетке. В дополнение к передаче энергии за счет столкновений твердых сфер движущийся атом теряет энергию путем взаимодействия с электронами в кулоновском поле соседних атомов периодической кристаллической решетки и т. д. Проблема сводится к следующему. Если мы можем описать зависимый от энергии поток падающих частиц и поперечное сечение передачи энергии (вероятность) при столкновениях атомов, то можно определить количество образовавшихся ПВА с различными энергиями и число смещенных атомов.

В этой главе мы сосредоточим внимание на количественном определении энергии, переданной при взаимодействии тел, а также на определении поперечного сечения передачи энергии. Начнем с реакций взаимодействия нейтронов с ядрами, так как нейтральность нейтрона позволяет оценивать взаимодействие более точно.

Таблица 1.1. Приближенный масштаб времени образования дефектов в облучаемых металлах [1]

Время, с	Процесс	Результат
10^{-18}	Передача энергии от падающей частицы	Образование ПВА
10^{-13}	Перемещение атомов в решетке за счет взаимодействия с ПВА	Каскад смещений
10^{-11}	Рассеяние энергии, спонтанная рекомбинация и образование кластеров	Стабильные пары Френкеля и кластеры дефектов
10^{-8}	Реакция дефектов и термическая миграция	Рекомбинация ПФ, захват, образование кластеров, эмиссия дефектов

Вслед за созданием ПВА происходят дальнейшие взаимодействия между атомами, при которых необходим учет положительных зарядов ядер и отрицательных зарядов электронного облака. Фактически межатомные взаимодействия с низким порогом энергии взаимодействия ион — атом в активной зоне и при ионном облучении в ускорителях с широким диапазоном энергий частиц могут привести к последнему типу взаимодействия — ионизирующему столкновению.

1.1. Взаимодействия нейтронов с атомными ядрами

1.1.1. Упругое рассеяние

Благодаря электрической нейтральности упругие соударения нейтронов с атомными ядрами могут быть представлены как столкновения твердых сфер. При прохождении нейтронов через тело существует ограниченная вероятность их столкновения с атомами решетки и передачи части энергии атому отдачи. Эта вероятность определена двойным дифференциальным поперечным сечением рассеяния (по энергии и углу), $\sigma_s(E_i, E_f, \Omega)$, где, E_i и E_f — начальная и конечная энергии, а Ω — пространственный угол рассеяния нейтрона. Нас часто интересует только вероятность рассеяния в зависимости от E_i и угла рассеяния. Однократное поперечное сечение рассеяния представлено в виде

$$\sigma_s(E_i, \Omega) = \int \sigma_s(E_i, E_f, \Omega) dE_f. \quad (1.1)$$

Полная вероятность рассеяния нейтронов энергии E_i равна

$$\sigma_s(E_i) = \int \sigma_s(E_i, \Omega) d\Omega. \quad (1.2)$$

В радиационных исследованиях мы заинтересованы поведением столкнувшегося атома. Следовательно, мы ищем поперечное сечение передачи энергии $\sigma_s(E_i, T)$ или вероятность упругого рассеяния нейтрона с энергией E_i на атоме массой M и передаче энергии отдачи T атому при столкновении. Но сначала необходимо найти энергию T и угол рассеяния. Чтобы сделать это, следует рассмотреть динамику двойных упругих соударений в системе центра масс и в лабораторной системе координат.

На рис. 1.1 показаны траектории пути нейтрона и ядра мишени до и после рассеяния, как это видно из лабораторной системы отсчета и из системы центра масс. Самый легкий способ получения соотношения между энергией взаимодействующего нейтрона, угла рассеяния и переданной энергией заключается в анализе динамики столкновения в системе центра масс (СМ). Когда столкновение рассматривается в системе центра масс, столкнувшиеся частицы, кажется, перемещаются в противоположных друг от друга направлениях. Закон сохранения импульса по оси сближения и отталкивания приводит к соотношениям

$$\begin{aligned} v_c m - V_c M &= 0, \\ v'_c m - V'_c M &= 0, \end{aligned} \quad (1.3)$$

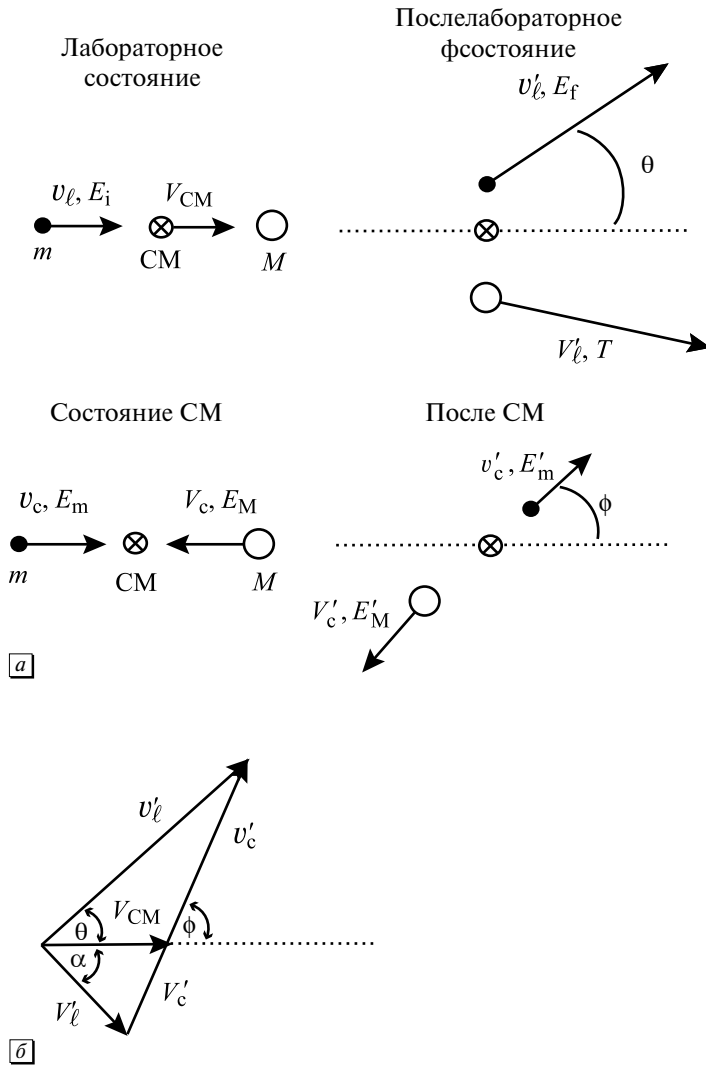


Рис. 1.1. Векторы скорости (а) в лабораторной системе и в системе центра масс (ЦМ); диаграмма (б), связывающая скорости в этих двух системах

закон сохранения кинетической энергии дает

$$\frac{1}{2} m v_c^2 + \frac{1}{2} M V_c^2 = \frac{1}{2} m v'_c{}^2 + \frac{1}{2} M V'_c{}^2. \quad (1.4)$$

Используя уравнение (1.3) для исключения v_c и v'_c , получаем

$$\left[\frac{1}{2}m\left(\frac{M}{m}\right)^2 + \frac{1}{2}M \right] V_c^2 = \left[\frac{1}{2}m\left(\frac{M}{m}\right)^2 + \frac{1}{2}M \right] V_c'^2. \quad (1.5)$$

Поскольку $V_c = V_c'$, то $v_c = v_c'$, так как ядра мишени в лабораторной системе координат находятся в покое и перемещаются налево со скоростью V_c в системе СМ, то сама система СМ должна перемещаться направо относительно лабораторной системы с той же самой скоростью V_c . Таким образом, если мы используем $V_{СМ}$ для обозначения скорости системы СМ относительно лабораторной системы, то величины $V_{СМ}$ и V_c должны быть одними и теми же (но противоположенных направлений), что можно представить в следующем виде:

$$v_c = v_c - V_{СМ} = v_c - V_c. \quad (1.7)$$

Используя уравнение (1.3), получим $V_{СМ}$:

$$V_{СМ} = \left(\frac{m}{M+m} \right) v_c. \quad (1.8)$$

Напомним, что мы хотим связать энергию T , переданную соударяемому атому под углом рассеяния ϕ в системе СМ. Используя векторное сложение, мы можем связать скорости ядер отдачи мишени в лабораторной системе V_c' под углом ϕ , как показано на рис. 1.1б. Используя схемы, представленные на рис. 1.1а, с учетом закона косинуса получим

$$V_c'^2 = V_{СМ}^2 + V_c'^2 - 2V_{СМ}V_c' \cos\phi. \quad (1.9)$$

Скорости в уравнениях 1.9 могут быть записаны в энергетических единицах:

$$V_c'^2 = \frac{2T}{M}, \quad V_{СМ}^2 = \frac{2E_i}{m} \left(\frac{m}{m+M} \right)^2 \quad \text{и} \quad V_c'^2 = \frac{2m}{M^2} E_m'.$$

Подставив эти выражения в (1.9), получим

$$T = \frac{mM}{(m+M)^2} E_i + \frac{m}{M} E_m' - 2 \left(\frac{m}{m+M} \right) (E_i E_m')^{1/2} \cos\phi, \quad (1.10a)$$

или

$$T = \eta_1 \eta_2 E_i + \frac{\eta_1}{\eta_2} E_m' - 2\eta_1 (E_i E_m')^{1/2} \cos\phi, \quad (1.10б)$$

где $\eta_1 = m/(m+M)$ и $\eta_2 = M/(m+M)$.

Так как мы хотим найти переданную энергию T в функции только начальной энергии и угла рассеяния, то используем соотношения между E_i и E'_m для исключения E'_ℓ . Из (1.7) и (1.8) видно, что

$$v'_c = v_\ell - \left(\frac{m}{m+M} \right) v_\ell = v_\ell \left(\frac{M}{m+M} \right). \quad (1.11)$$

Записывая (1.11) в энергетических единицах, получим

$$E'_m = E_i \left(\frac{M}{m+M} \right) = \eta_2^2 E_i. \quad (1.12)$$

Подставив это выражение в (1.10б), получим в упрощенном виде

$$T = \frac{\gamma}{2} E_i (1 - \cos \phi), \quad (1.13)$$

где

$$\gamma = \frac{4mM}{(M+m)^2} = \frac{4A}{(1+A)^2}. \quad (1.14)$$

Если $1 = m$ и $A = M$, то T зависит только от одного неизвестного ϕ , как показано на рис. 1.2. Передаваемая энергия возрастает от 0 при $\phi = 0$ до максимума γE_i при $\phi = \pi$, или $T_{\min} = \check{T} = 0$ и $T_{\max} = \hat{T} = \gamma E_i$. Таким образом, переданная энергия максимальна при появлении обратного рассеяния и минимальна, когда частица не попадает в цель, не вызывая какого-либо изменения ее направления ($\phi = 0$).

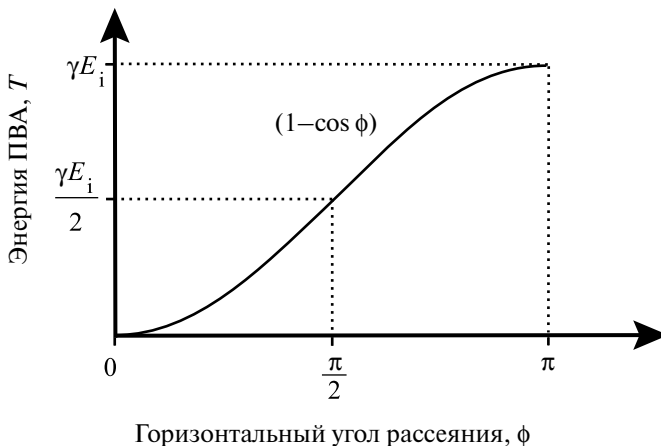


Рис. 1.2. Передача энергии в зависимости от угла рассеяния в системе центра масс

Пример 1.1. Для случая столкновения нейтрона с водородным атомом $\hat{T}_{n-H}/E_i = 1,0$, а при столкновении нейтрона с атомом урана $\hat{T}_{n-U}/E_i = 0,017$. Наоборот, при сравнении взаимодействия атома железа с ионами ксенона 100 кэВ Xe^+ или с электронами, значение γ при взаимодействии Хе-Fe равно 0,83, приводя к значению $T = 83\,000$ эВ. Однако величина γ при взаимодействии с e^- -Fe 0,00004 дает значение T , равное только 4 эВ, что, как будет видно из главы 2, явно недостаточно для смещения атома железа в решетке. Углы рассеяния в лабораторной системе для проникающей частицы (θ) и атома отдачи (α) могут быть написаны в терминах углов рассеяния (ϕ) в системе центра масс с использованием векторной диаграммы рис. 1.1б. Применим закон синусов к рис. 1.1б для рассеянной частицы

$$\frac{v'_\ell}{\sin(\pi - \theta)} = \frac{v'_c}{\sin \theta},$$

где v'_c представлено уравнениями (1.6) и (1.7):

$$v'_c = V_{\text{CM}} \left(\frac{v_\ell}{V_{\text{CM}}} - 1 \right),$$

и, используя (1.8), получим

$$v'_c = V_{\text{CM}} \frac{M}{m}.$$

Применив закон косинусов к тому же треугольнику, получим

$$v'_\ell{}^2 = v'_c{}^2 + V_{\text{CM}}^2 - 2V_{\text{CM}}v'_c \cos(\pi - \phi).$$

Объединив три последних уравнения, выразим значение θ в функции ϕ :

$$\tan \theta = \frac{(M/m) \sin \phi}{1 + (M/m) \cos \phi}.$$

Применив закон синусов к векторной диаграмме рис. 1.1б, получим для смещенного атома

$$\frac{V'_c}{\sin \alpha} = \frac{V'_\ell}{\sin \phi}.$$

Объединив этот результат с (1.6) и (1.9), где энергии выражены в скоростных терминах, получим

$$\tan \alpha = \frac{\sin \phi}{1 - \cos \phi}.$$

Мы по-прежнему заинтересованы в оценке вероятности передачи данной энергии T атому отдачи. Это зависит от значения дифференциального поперечного сечения рассеяния. Определим $\sigma_s(E_i, \phi) d\Omega$ как вероятность столкновения, представляющую рассеяние падающей частицы от угла центра масс в диапазоне $(\phi, d\Omega)$, где $d\Omega$ — элемент телесного угла в направлении рассеяния ϕ . Так как вероятности рассеяния, написанные в преобразованных переменных, эквивалентны, то $\sigma_s(E_i, \phi)$ может быть записан в терминах переменных СМ:

$$\sigma_s(E_i, T) dT = \sigma_s(E_i, \phi) d\Omega. \quad (1.15)$$

Используя рис. 1.3 для связи $d\Omega$ с $d\phi$ и имея по определению

$$d\Omega = dA/r^2, \quad (1.16)$$

получим из рис. 1.4

$$d\Omega = \frac{r d\phi (2\pi r \sin \phi)}{r^2} = 2\pi \sin \phi d\phi. \quad (1.17)$$

Подставив (1.17) в (1.15), получим

$$\sigma_s(E_i, T) dT = \sigma_s(E_i, \phi) d\Omega = 2\pi \sigma_s(E_i, \phi) \sin \phi d\phi. \quad (1.18)$$

Так как $T = \gamma/2E_i(1 - \cos \phi)$, то $dT = E_i \sin \phi d\phi$

и

$$\sigma_s(E_i, T) = \frac{4\pi}{\gamma E_i} \sigma_s(E_i, \phi). \quad (1.19)$$

На рис. 1.5 показано различие в дифференциальных поперечных сечениях рассеяния в единицах площади телесного угла в зависимости

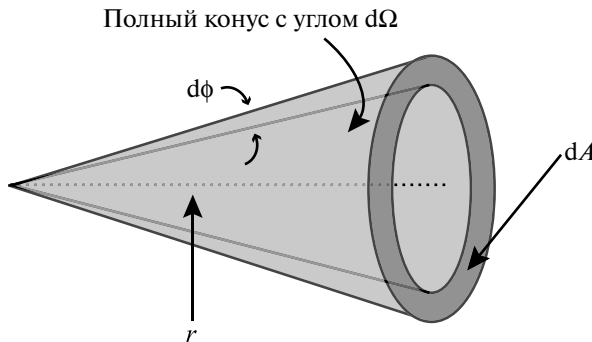


Рис. 1.3. Рассеяние в телесном угловом элементе $d\Omega$, определяемом как dA/r^2

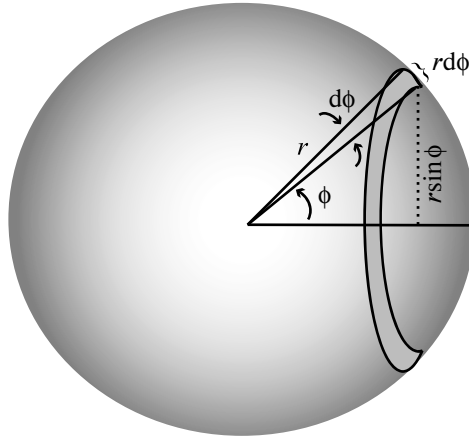


Рис. 1.4. Телесный угол $d\Omega$, появляющийся при угле рассеяния ϕ , возрастает с углом $d\phi$

от площади единицы угла в соответствии с уравнением (1.18). Хотя число рассеянных атомов при приращении угла $d\phi$ около $\phi = \pi/2$ больше, чем при угловом приращении $d\phi$ вблизи значений $\phi = 0$ или π (рис. 1.5а), число охвата сферической поверхности в единицах телесного угла является постоянным по всем углам ϕ (рис. 1.5б). Следовательно, значения $dT/d\phi$ изменяются синусоидальным образом от ϕ , но $dT/d\Omega$ не зависит от ϕ .

Используя уравнения (1.2) и (1.18), получим полное упругое поперечное сечение рассеяния

$$\sigma_s(E_i) = \int \sigma_s(E_i, \phi) d\Omega = 2\pi \int \sigma_s(E_i, \phi) \sin \phi d\phi.$$

Если предположить, что упругое рассеяние в системе СМ не зависит от угла рассеяния (то есть рассеяние изотропно, рис. 1.6), то

$$\sigma_s(E_i) = \int \sigma_s(E_i, \phi) d\Omega = 2\pi \sigma_s(E_i, \phi) \int \sin \phi d\phi = 4\pi \sigma_s(E_i, \phi) \quad (1.20)$$

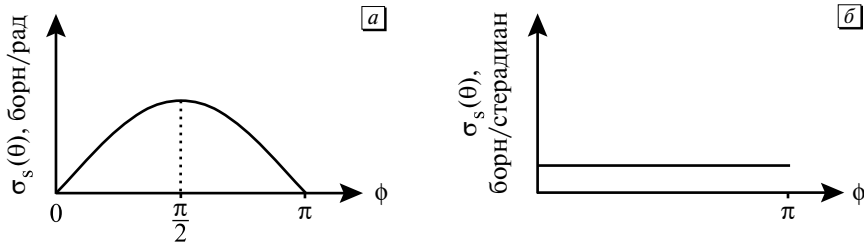


Рис. 1.5. Изотропное дифференциальное поперечное сечение рассеяния в единицах площади угла рассеяния (а) и (б) площади угла рассеяния на единицу телесного угла

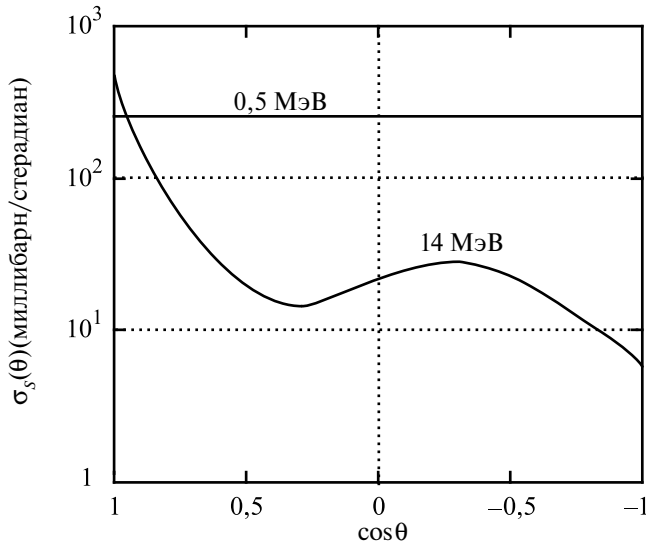


Рис. 1.6. Дифференциальное упругое поперечное сечение рассеяния для C^{12} при энергии нейтронов 0,5 МэВ и 14 МэВ в функции косинуса угла рассеяния в системе центра масс [2]

и
$$\sigma_s(E_i, T) = \frac{\sigma_s(E_i)}{\gamma E_i}, \tag{1.21}$$

что означает независимость от T ! Таким образом, вероятность $\sigma_s(E_i, T)$, что нейтрон с энергией E_i , упруго рассеянный на атоме массы M , передаст энергию отдачи T пораженному атому и не зависит от энергии отдачи. Теперь средняя энергия отдачи может быть вычислена как

$$\bar{T} = \frac{\int_{\hat{T}}^{\hat{T}} T \sigma_s(E_i, T) dT}{\int_{\hat{T}}^{\hat{T}} \sigma_s(E_i, T) dT} = \frac{\bar{T} + \hat{T}}{2} \approx \frac{\hat{T}}{2} = \frac{\gamma E_i}{2}. \tag{1.22}$$

Используя уравнение (1.22) для соударения нейтронов 1 МэВ с резкой массой элементов, получим

1 МэВ n on C:	$\gamma = 0,28$	$\bar{T} = 0,14$ МэВ
1 МэВ n on Fe:	$\gamma = 0,069$	$\bar{T} = 0,035$ МэВ
1 МэВ n on U:	$\gamma = 0,017$	$\bar{T} = 0,009$ МэВ.

В дополнение к только что обсужденному упругому рассеянию энергия может передаваться неупругим рассеянием по реакциям $(n, 2n)$ и (n, γ) . Первые две реакции становятся значимыми при энергиях нейтронов соответственно выше 1,0 и 8,0 МэВ, в то время как на ^{235}U это рассеяние происходит при энергиях тепловых нейтронов.

1.1.2. Неупругое рассеяние

Неупругое рассеяние характеризуется реакцией, в которой испускаемая частица та же, что и захваченная частица, но в системе осуществляется потеря кинетической энергии, заключающаяся, например, в энергии возбуждения ядер элемента $N^{14}(p, p')N^{14*}$ или $C^{14}(n, n')C^{14*}$. Различия в энергиях групп рассеянных частиц соответствуют энергии возбужденных уровней в ядрах элемента

$$-Q = \sum_f KE_f - \sum_i KE_i = \sum_f M_f c^2 - \sum_i M_i c^2.$$

При неупругом столкновении нейтрон поглощается ядром, формируя составное ядро, которое испускает нейтрон и γ -лучи. Возможно испускание более чем одного γ -кванта и ядро может остаться в возбужденном состоянии в процессе взаимодействия. Неупругое поперечное сечение рассеяния может быть подразделено на разрешенные и неразрешенные резонансные компоненты [3].

Для определенного (j -го резонанса) ядра мишени поперечное сечение рассеяния является функцией Q_j , энергия γ -распада остаточного ядра всегда отрицательна. Аналогично уравнению (1.15) можно написать равенства $\sigma_{sj}(E_i, Q_j, T)dT = \sigma_{sj}(E_i, Q_j, \phi)d\Omega$ и получить

$$\sigma_{sj}(E_i, Q_j, T) = \sigma_{sj}(E_i, Q_j, \phi) 2\pi \sin \phi \frac{d\phi}{dT}. \quad (1.23)$$

Однако выражение для T в уравнении (1.13) не выполняется для неупругих столкновений, так как кинетическая энергия не сохраняется. Вместо этого необходимо обратить внимание на сохранение полной энергии. Если ядро мишени M в лабораторной системе находится в покое и частица m обладает энергией E_i , то баланс энергии в координатах ЦМ равен

$$\frac{M}{M+m} E_i + Q_j = E'_m + E'_M, \quad (1.24)$$

где Q_j — энергия реакции и E'_m и E'_M — кинетические энергии в координатах ЦМ вылетающей частицы и ядра соответственно. Используя закон сохранения импульса

$$mE'_m = ME'_M, \quad (1.25)$$

и объединив уравнение (1.24) с уравнением (1.25) (в предположении, что массы частицы и ядра мишени не изменяются после реакции), получим

$$E'_m = \frac{M}{M+m} \left(Q_j + \frac{M}{M+m} E_i \right),$$

$$E'_m = \eta_2 (Q_j + \eta_2 E_i). \quad (1.26)$$

Записывая общее выражение для T (1.10б)

$$T = \eta_1 \eta_2 E_i + \frac{\eta_1}{\eta_2} E'_m - 2\eta_1 (E_i E'_m)^{1/2} \cos \varphi$$

и заменив E'_m из выражения (1.26), получим

$$T(E_i, Q_j, \varphi) = \frac{\gamma}{2} E_i - \frac{\gamma}{2} \left[E_i \left(E_i + Q_j \frac{A+1}{A} \right) \right]^{1/2} \cos \varphi + \frac{Q_j}{A+1}. \quad (1.27)$$

Теперь выражение для $dT/d\varphi$ имеет вид

$$\frac{dT(E_i, Q_j, \varphi)}{d\varphi} = \frac{\gamma}{2} E_i \left[1 + \frac{Q_j}{E_i} \frac{A+1}{A} \right]^{1/2} \sin \varphi. \quad (1.28)$$

Заметим, что в случае упругих соударений $Q_j = 0$ и уравнение (1.27) превращается в (1.13). Если мы теперь предположим, что неупругое рассеяние изотропно в системе ЦМ, то тогда получим

$$\sigma_{sj}(E_i, Q_j) = \int \sigma_{sj}(E_i, Q_j, \varphi) d\Omega = 4\pi \sigma_{sj}(E_i, Q_j, \varphi). \quad (1.29)$$

Подстановка значений (1.28) и (1.29) в (1.23) приводит к соотношению для неупругих соударений в разрешенной резонансной области

$$\sigma_{sj}(E_i, Q_j, T) = \frac{\sigma_{sj}(E_i, Q_j)}{\gamma E_i \left(1 + \frac{Q_j}{E_i} \frac{A+1}{A} \right)^{1/2}}. \quad (1.30)$$

Когда сложное ядро возбуждено при достаточно высоких энергиях, уровни резонанса накладываются и больше индивидуально не различаются. Поперечное сечение неупругого рассеяния рассматривается так же, как для сплошной среды и описывается моделью испарения [3] в виде

$$\sigma_{is}(E_i, E'_m, T) = \sigma(E_i) \frac{f(E_i, E'_m)}{4 \frac{1}{A+1} (E_i E'_m)^{1/2}},$$

$$\sigma_{is}(E_i, T) = \sigma_{is}(E_i) \int_0^{E'_m \max} \frac{f(E_i, E'_m)}{4 \frac{1}{A+1} (E_i E'_m)^{1/2}} dE'_m, \quad (1.31)$$

где $f(E_i, E'_m)$ является функцией распределения энергии E'_m рассеянного нейтрона в системе ЦМ, которая представляет вероятность, что нейтрон из движущегося составного ядра испарен. Его значение в системе ЦМ представляется ? температурой ядра $E_D = kT$

$$f(E_i, E'_m) = \frac{E'_m}{I(E_i)} e^{(-E'_m/E_D)}, \tag{1.32}$$

$$I(E_i) = E_D^2 \left[1 - \left(1 + \frac{E'_m^{\max}}{E_D} \right) e^{-E'_m^{\max}/E_D} \right]. \tag{1.33}$$

Коэффициент нормировки имеет вид

$$\int_0^{E'_m^{\max}} f(E_i, E'_m) dE'_m = 1. \tag{1.34}$$

Максимальное значение E'_m дано в уравнении (1.26) с самым низким энергетическим уровнем $Q - Q_1$, и минимальное значение E'_m равно нулю.

1.1.3. Реакции (n, 2n)

Такие реакции, как (n, 2n), связанные с появлением дополнительных нейтронов, приводят к заметным радиационным эффектам, способным вызвать повреждения или трансмутацию ядер мишени. Согласно модели испускания 2n нейтронов, основанной на работах Одетта [4] и Сегова [5], второй нейтрон испускается, только если остаточное возбуждение ядер после эмиссии первого нейтрона превышает энергию связи нейтрона в массе M нуклида. Энергия отдачи после эмиссии первого нейтрона определяется средним значением ($\cos \phi = 0$ в выражении (1.10б)) и показана на рис. 1.7а в лабораторной системе. Затем рассмотрим вторую реакцию (эмиссию) в системе ЦМ, представленную на рис. 1.7б. Начнем с использования закона косинусов для связи V_c'' с ϕ

$$V_\ell''^2 = V_\ell'^2 + V_c''^2 - 2V_\ell' V_c'' \cos \phi. \tag{1.35}$$

Из рис. 1.7а имеем

$$\frac{1}{2} M V_\ell'^2 = \bar{T}_\ell \quad \text{или} \quad V_\ell'^2 = \frac{2\bar{T}_\ell}{M},$$

а из рис. 1.7б имеем

$$\frac{1}{2} (M - m) V_c''^2 = E_M'' \quad \text{или} \quad V_c''^2 = \frac{2E_M''}{M - m}.$$

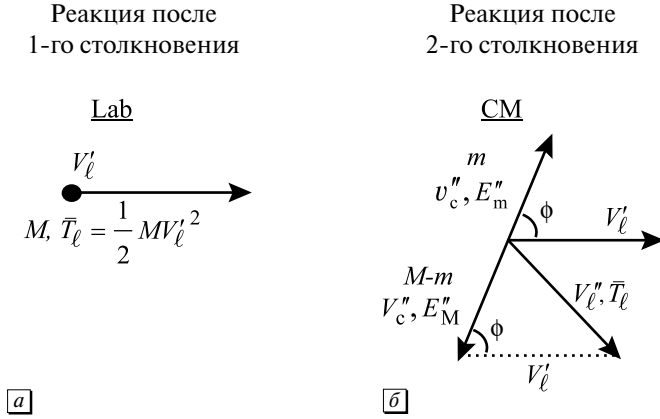


Рис. 1.7. Векторы скорости для реакции (n, 2n) в лабораторной системе (а) и в системе центра масс (б)

Используя закон сохранения импульса

$$(M - m)V_c'' = m v_c'' , \tag{1.36}$$

после возведения в квадрат получим

$$V_c'' = \left(\frac{m}{M - m} \right)^2 v_c''^2 = \frac{2m}{(M - m)^2} E_m'' . \tag{1.37}$$

Далее с учетом (1.35) имеем

$$V_l''^2 = \frac{2\bar{T}_l}{M} + \frac{2m}{(M - m)^2} E_m'' - 2 \left(\frac{2m}{(M - m)^2} \frac{2}{M} E_m'' \bar{T}_l \right)^{1/2} \cos \phi , \tag{1.38}$$

где $\bar{T}_l = \eta_1 \eta_2 E_1 + (\eta_1 / \eta_2) E_m'$ — среднее значение энергии отдачи после эмиссии первого нейтрона. Записывая $V_l''^2$ в терминах энергии, получим значение энергии отдачи после второй эмиссии

$$\begin{aligned} T &= \frac{1}{2} (M - m) V_l''^2 \\ &= \frac{M - m}{M} \bar{T}_l + \frac{m}{M - m} E_m'' - 2 \left(\frac{m}{M} \right)^{1/2} (E_m'' \bar{T}_l)^{1/2} \cos \phi \\ &= \frac{A - 1}{A} \bar{T}_l + \frac{1}{A - 1} E_m'' - 2 \left(\frac{1}{A} \right)^{1/2} (\bar{T}_l E_m'')^{1/2} \cos \phi \\ &= \frac{A}{A - 1} \frac{\eta_1}{\eta_2} E_m'' + \frac{A - 1}{A} \bar{T}_l - 2 \left(\frac{\eta_1}{\eta_2} \right)^{1/2} (\bar{T}_l E_m'')^{1/2} \cos \phi . \end{aligned} \tag{1.39}$$

Поперечное сечение реакции (n, 2n) представляет особый случай неупругого поперечного сечения рассеяния, приведенного в уравнении (1.31):

$$\sigma_{n,2n}(E_i, E'_m, E''_m, T) = \sigma_{n,2n}(E_i) \frac{E'_m}{I(E_i)} e^{-E'_m/E_D} \frac{E''_m}{I(E_i, E'_m)} e^{-E''_m/E_D}$$

и
$$\sigma_{n,2n}(E_i, T) = \int_0^{E_i-U} \frac{E'_m}{I(E_i)} e^{-E'_m/E_D} \int_0^{E_i-U-E'_m} \frac{E''_m}{I(E_i, E'_m)} e^{-E''_m/E_D} dE''_m dE'_m, \quad (1.40)$$

где $I(E_i)$ приведено в уравнении (1.33) при $E'_m{}^{\max} = E_i - U$ и $I(E_i, E'_m)$ с $E'_m{}^{\max}$, замененным на $E''_m{}^{\max} = E_i - U - E'_m$, и для реакции (n, 2n) $U = 0$ [3].

1.1.4. Реакции (n, γ)

Другой класс реакций, который может повлиять на степень радиационного повреждения, связан с эмиссией фотона. Эти реакции важны, так как энергия выбитого ядра достаточна для смещения атома. Как позже увидим, этот тип смещения особенно заметен при радиационном повреждении активной зоны судовых реакторных корпусов под давлением, в которых поток гамма-лучей более сопоставим с потоком быстрых нейтронов, чем с уровнем нейтронов активной зоны ядерного реактора. Напомним законы сохранения импульса и энергии уравнений (1.3) и (1.4) и схему рис. 1.1 с (n, γ)-реакцией. $E_i \sim 0$ (поскольку эта реакция проходит с тепловыми нейтронами энергий 0,025 эВ), $E_r = 0$ (так как нет рассеянных нейтронов) и Q равноценно значению различия масс между начальными частицами и составным ядром. Когда составное ядро не возбуждено, оно испускает γ -квант с этой энергией. Сохранение импульса показывает, что отдача ядра должна проходить с импульсом

$$(m + M)V'_c = E\gamma/c. \quad (1.41)$$

Заметим, что это является приближением, так как мы не исключили дефект массы из составного ядра. Возведение в квадрат обеих частей уравнения (1.41) и деление на $2(m + M)$ дает

$$\frac{1}{2}(m + M)V'_c{}^2 = \frac{E_\gamma^2}{2(m + M)c^2}.$$

Как в случае упругого рассеяния, T можно представить в виде

$$T = (V_{CM}^2 + V_c'^2 - 2V_{CM}V_c'\cos\phi) \left(\frac{M + m}{2} \right),$$

но, исключая $V_{CM} \ll V_c'$, получим лучшую оценку

$$T \cong \left(\frac{m+M}{2} \right) V_c'^2 = \frac{E_\gamma^2}{2(M+m)c^2}.$$

Предположим далее, что это значение T представляет максимальную энергию отдачи. Но так как не вся энергия Q будет испускаться γ -лучами, то среднюю энергию отдачи следует оценить как половину значения максимальной энергии отдачи

Таблица 1.2. Передача энергии и поперечное сечение передачи для различных видов соударения нейтронов с атомами

Вид соударения	Передача энергии и поперечное сечение передачи	Уравнение в тексте
Упругое рассеяние	$T = \frac{\gamma}{2} E_i (1 - \cos\phi)$	(1.13)
	$\sigma_s(E_i, T) = \frac{\sigma_s(E_i)}{\gamma E_i}$	(1.21)
Неупругое рассеяние	$T(E_i, Q_j, \phi) = \frac{\gamma}{2} E_i - \frac{\gamma}{2} \left[E_i \left(E_i + Q_i \frac{A+1}{A} \right) \right]^{1/2} \cos\phi + \frac{Q_j}{A+1}$	(1.27)
	резонансная область	
	$\sigma_{s,j}(E_i, Q_j, T) = \frac{\sigma_{s,j}(E_i, Q_j)}{\gamma E_i \left(1 + \frac{Q_j}{E_i} \frac{1+A}{A} \right)^{1/2}}$	(1.30)
	неразрешенная резонансная область	
	$\sigma_{is}(E_i, T) = \sigma_{is}(E_i) \int_0^{E_m^{\max}} \frac{f(E_i, E_m')}{4 \frac{1}{A+1} (E_i, E_m')^{1/2}} dE_m'$	(1.31)
(n, 2n)	$T = \frac{A}{A-1} \frac{\eta_1}{\eta_2} E_m'' + \frac{A-1}{A} \bar{T}_\ell - 2 \left(\frac{\eta_1}{\eta_2} \right)^{1/2} (\bar{T}_\ell E_m'')^{1/2} \cos\phi$	(1.39)
	$\sigma_{n,2n}(E_i, T) = \int_0^{E_i-U} \frac{E_m'}{I(E_i)} e^{-E_m'/E_D} \cdot \int_0^{E_i-U-E_m'} \frac{E_m''}{I(E_i, E_m')} e^{-E_m''/E_D} dE_m'' dE_m'$	(1.40)
(n, γ)	$\bar{T} \cong \frac{E_\gamma^2}{4(M+m)c^2}$	(1.42)
	$\sigma_{n,\gamma}(E_i) = \sigma_0 \sqrt{\frac{E_0}{E_i}} \left\{ \frac{1}{[(E_i - E_0)/(\Gamma/2)]^2 + 1} \right\}$	(1.44)

$$\bar{T} \cong \frac{E_\gamma^2}{4(M+m)c^2}. \quad (1.42)$$

Поперечное сечение захвата при излучении получено по одноуровневой формуле Брейта — Вигнера, когда у ядер мишени собственный момент импульса равен нулю, а у составного ядра есть нейтронная ширина Γ_n , радиационная ширина Γ_γ , полная ширина Γ , а E_0 — энергия резонанса и λ — длина волны [6]:

$$\sigma_{n,\gamma}(E_i) = \pi\lambda^2 \frac{\Gamma_n \Gamma_\gamma}{(E_i - E_0)^2 + (\Gamma/2)^2}. \quad (1.43)$$

Выразив уравнение (1.43) в терминах σ_0 , найдем максимальное значение поперечного сечения захвата при излучении (для $E = E_0$), приняв Γ_n пропорционально $1/\lambda$ и \sqrt{E} :

$$\sigma_{n,\gamma}(E_i) = \sigma_0 \sqrt{\frac{E_0}{E_i}} \left\{ \frac{1}{[(E_i - E_0)/(\Gamma/2)]^2 + 1} \right\}. \quad (1.44)$$

Табл. 1.2 предоставляет сводку выражений передачи энергии и поперечных сечений передачи энергии для различных типов реакций, рассмотренных в разделе 1.1.

1.2. Взаимодействие между ионами и атомами

Столкновение ионов с атомами или атомов с атомами определяется взаимодействиями электронных облаков, электронного облака с ядром и взаимодействием между ядрами. Эти взаимодействия описываются, как известно, межатомными потенциалами. Для того чтобы определить поперечное сечение передачи энергии между взаимодействующими атомами, необходимо представить функции потенциала, которые управляют таким взаимодействием. К сожалению, не существует какой-либо единой функции, описывающей все взаимодействия. Природа взаимодействия в значительной степени зависит от энергии атома и, следовательно, от наименьшего расстояния близких ядер. В следующем разделе рассматривается сводка межатомных потенциалов [7].

1.2.1. Межатомные потенциалы

Конечный результат нейтронно-ядерного взаимодействия — создание первичного атома отдачи с некоторым запасом кинетической энергии.

Этот атом осуществит последующие столкновения с другими атомами кристалла. Знание сил, действующих между двумя соударяющимися атомами, представляет основу задачи радиационного повреждения, без которого надлежащее описание первичного акта соударения и образования последующих дефектов структуры невозможно. Нам необходимо определить силы взаимодействия между подобными атомами, различными атомами или ионами и атомами. Описание взаимодействий между атомами проведено с использованием функции потенциала. Напомним, что атомы (обычно) электрически нейтральны, но составлены из положительных и отрицательных компонентов, что не исключает их пространственного взаимодействия. Известно, что потенциальная энергия между двумя зарядами одного знака, расположенными на расстоянии r , описывается хорошо известным уравнением Кулона

$$V(r) = k_e \frac{e^2}{r}, \quad (1.45)$$

где $k_e = \frac{1}{4\pi\epsilon_0}$ — постоянная Кулона, e_0 — электрическая постоянная, e — единичный электронный заряд и $e^2 = 1,44$ эВ/нм. Однако в случае с атомами заряженные ядра окружены электронным облаком противоположного знака. Очевидно, что функция потенциала, описывающая взаимодействие между атомами, намного более сложна. Даже в самых простых случаях $V(r)$ никогда не определялся точно, но некоторые упрощенные соображения показывают, что взаимодействие должно определяться двумя различными вкладками в диапазоне интересующих нас расстояний. Возможно, самой простой из всех потенциальных функций является модель «твердые сферы». Этот потенциал описывается следующим образом:

$$V(r) = \begin{cases} 0 & \text{для } r > r_0 \\ \infty & \text{для } r \leq r_0. \end{cases} \quad (1.46)$$

Эта функция потенциала описывает взаимодействие атомов на расстояниях радиуса атома r_0 и характеризуется резким спадом. На расстояниях, превышающих этот радиус, взаимодействие исчезает, в то время как на расстояниях, меньших r_0 , значение становится бесконечным. Такой вид взаимодействия совпадает с поведением сталкивающихся бильярдных шаров, и, следовательно, атомы этой модели действуют подобным образом. Ясно, что такое представление не дает реального описания межатомного взаимодействия, так как электронные оболочки могут перекрываться.

На рис. 1.8 показано, как межатомный потенциал в действительности меняется с расстоянием. При больших расстояниях атомов основное взаимодействие осуществляется силами Кулона, в то время как при меньших расстояниях отталкивающая сила в центральном поле становится доминирующей. Подобная зависимость применима ко всем кристаллам независимо от природы связи. Во всех случаях существует гладкая кривая с минимумом, соответствующим наименьшему расстоянию ближайших атомов решетки (обычно обозначаемому D).

В описании взаимодействия между атомами использовано два базисных критерия отсчета. Один — радиус Бора водородного атома ($a_0 = 0,053$ нм), который обеспечивает определение положения атомных оболочек. Другой определяет интервал между ближайшими атомами в кристалле (обычно $\sim 0,25$ нм). Когда $r \ll r_c$, электроны занимают самые низкие энергетические уровни (закрытые оболочки) индивидуальных атомов и только на внешних оболочках имеются пустые валентные уровни. При сближении двух атомов валентные оболочки начинают перекрываться и появляются слабые силы притяжения Ван-дер-Ваальса. Когда $a_0 < r \leq r_c$, начинают перекрываться закрытые внутренние оболочки. Вследствие принципа запрета Паули некоторые электроны меняют свои уровни и перемещаются на более высокие энергетические уровни с затратой дополнительной энергии, вызывающей сближение атомов с положительной потенциальной энергии взаимодействия. Это явление обу-

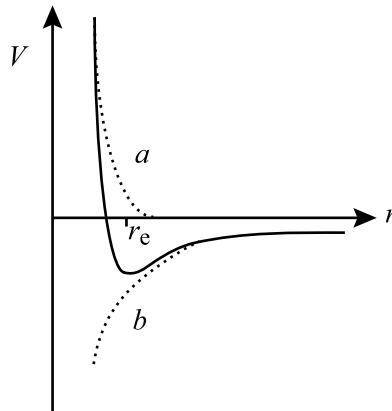


Рис. 1.8. Изменение межатомного потенциала с расстоянием r . Кулоновские силы действуют на больших расстояниях (b), а центральная отталкивающая сила доминирует на малых расстояниях и промежуточных расстояниях (a). Существует гладкий переход между этими двумя состояниями с минимумом, соответствующим равновесному расстоянию r_e или D

словлено отталкиванием закрытых оболочек с известным потенциалом Борна — Майера, который наиболее точно описывает эту область:

$$V(r) = A \exp(-r/B), \quad (1.47)$$

где A и B — константы, определяемые из упругих модулей [8]. Хотя эта функция сначала использовалась Борном и Майером для представления отталкивания ядер ионов в их теории ионных кристаллов, она полностью приемлема для равновесных расстояний порядка r_c и полезна при оценках пороговых или близких к пороговым столкновений, где параметр соударения имеет значение порядка r_c .

Когда $r \ll a_0$, кулоновское взаимодействие между ядрами доминирует над всеми другими составляющими в уравнении $V(r)$:

$$V(r) = \frac{Z_1 Z_2 \varepsilon^2}{r}. \quad (1.48)$$

На небольших расстояниях ядерные заряды «электростатически» экранируются пространственным зарядом самых внутренних электронных оболочек, вошедших в межъядерное пространство. Потенциал, описывающий такое поведение, известен как экранированный потенциал Кулона [8, 9, 10, 11, 12]

$$V(r) = \left(\frac{Z_1 Z_2 \varepsilon^2}{r} \right) \exp(-r/a), \quad (1.49)$$

$$a = \frac{C a_0}{(Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{1/2}} \quad \text{или} \quad a = \frac{C a_0}{(Z_1 Z_2)^{1/6}}, \quad C = 0,8853,$$

где a_0 — радиус Бора водородного атома

Более полное экранирование электронным облаком описывается функцией экранирования $\chi(r)$, которая определяется отношением фактического атомного потенциала для радиуса r к потенциалу Кулона. Функция $\chi(r)$ должна понижать потенциал Кулона для описания взаимодействия между атомами на всех расстояниях, разделяющих атомы. Для больших расстояний $\chi(r)$ стремится к нулю, а на очень маленьких расстояниях $\chi(r)$ приближается к единице. Это один из путей, которым можно воспользоваться для описания всех столкновений единой межатомной потенциальной функцией.

Мы теперь представили два режима взаимодействия. При малых расстояниях ($r \ll a_0$) экранированная составляющая Кулона доминирует над

всеми другими. Эффект экранирования спадает по экспоненте с увеличением расстояния. В области $a_0 < r \leq r_e$ взаимодействие электронов доминирует и лучше всего описывается потенциалом Борна—Майера. На промежуточных расстояниях удовлетворительного описания природы атомного взаимодействия нет. К сожалению, для обеспечения надлежащего аналитического описания радиационных повреждений именно в этой области необходима более точная информация.

Тем не менее можно сделать первое приближение к общему потенциалу, суммируя потенциалы, контролирующие взаимодействия на больших и малых расстояниях:

$$V(r) = \frac{Z_1 Z_2 \epsilon^2}{r} \exp(-r/a) + A \exp(-r/B), \quad (1.50)$$

где $A = 2,58 \cdot 10^5 (Z_1 Z_2)^{11/4} \text{эВ}$, $B = 1,5 a_0 / (Z_1 Z_2)^{1/6}$ являются эмпирическими выражениями, предложенными Бринкманом [11] на основе наблюдений за способностями к сжатию и значениями упругих модулей благородных металлов Cu, Ag и Au. К сожалению, имеется не много экспериментальных данных о действующих силах между металлическими атомами, которые более всего нас интересуют. Из рис. 1.9 видно, что первый член доминирует на малых расстояниях, а второй — на больших.

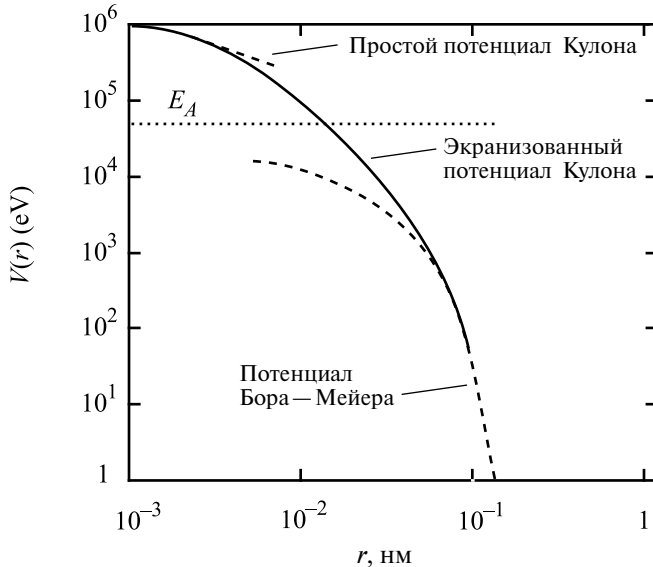


Рис. 1.9. Изменение различных функций потенциала на расстояниях, разделяющих атомы меди

Бринкман предложил модель взаимодействия между двумя идентичными атомами, в которых ядро окружено четким распределением заряда ρ_e , и, предполагая, что оба атома обладают экранированным кулоновским полем одинакового вида, определил

$$V(r) = \frac{Z^2 \epsilon^2}{r} e^{-r/a} \left(1 - \frac{r}{2a} \right). \quad (1.51)$$

Эта формула близка к выражению кулоновских сил отталкивания, поскольку при приближении r к нулю знак при $r = 2a$ изменяется, становясь потенциалом со слабым притяжением при минимуме $r = a(1 + \sqrt{3})$. Однако этот потенциал предсказывает сильную энергию взаимодействия при больших расстояниях и, возможно, не определяет истинную физическую картину для металлов. Бринкман сформулировал новую потенциальную функцию

$$V(r) = \frac{AZ_1 Z_2 \epsilon^2 \exp(-Br)}{1 - \exp(-Ar)}. \quad (1.52)$$

Отметим, что при малых r потенциал приближается к значениям кулоновских сил отталкивания, то есть

$$\lim_{r \rightarrow 0} V(r) \rightarrow \frac{Z_1 Z_2 \epsilon^2}{r},$$

и при больших расстояниях формула потенциала приближается к виду показательной функции Борна — Майера

$$\lim_{r \rightarrow \infty} V(r) \rightarrow AZ_1 Z_2 \epsilon^2 \exp(-Br).$$

Константа B определена в виде $B = Z_{\text{eff}}^{1/3} C a_0$, где $Z_{\text{eff}} = (Z_1 Z_2)^{1/2}$ и C принимает значение порядка 1,0 или 1,5. Константа A зависит от сжимаемости и объемного модуля, которые зависят, в свою очередь, от перекрытия замкнутых электронных оболочек. Эмпирическое выражение для A равно

$$A = \frac{0,95 \cdot 10^{-6}}{a_0} Z_{\text{eff}}^{7/6}.$$

Подставив A , B и C ($= 1,5$) в уравнение (1.52), получим

$$V(r) = 1,9 \cdot 10^{-6} Z_{\text{eff}}^{1/2} E_R \frac{\exp(-Z_{\text{eff}}^{1/3} r/1,5a_0)}{1 - \exp(-0,95 \cdot 10^{-6} Z_{\text{eff}}^{7/6} r/a_0)}, \quad (1.53)$$

где $E_R = \epsilon^2/2a_0$ — энергия Ридберга (13,6 эВ).

Следует отметить, что хотя потенциал является достаточно надежной функцией для всех металлов, атомное число которых превышает 25 с диапазоном $r < 0,7r_e$, он не должен использоваться вблизи значений $r = r_e$, так как по определению неявно предполагалось, что все межатомные расстояния должны быть близки к таковым значениям для Cu, Ag и Au. Для вычисления энергий формирования и миграции точечных дефектов необходимо использовать только действительный потенциал.

Следует обсудить также два других потенциала. Первый из них — потенциал Фирсова или Томаса — Ферми с двумя центрами. Эта потенциальная функция представляет модернизированный экранированный потенциала Кулона с учетом изменения энергии электронов при взаимном сближении ядер. Потенциал может быть записан в виде

$$V(r) = \frac{\chi(r)}{r},$$

где $\chi(r)$ является экранирующей функцией. Для случая экранирующего потенциала Кулона $\chi(r)$ имеет вид

$$\begin{aligned} \chi(r) &= \chi_B(r), \\ \chi_B(r) &= Z_1 Z_2 \epsilon^2 \exp(-r/a). \end{aligned} \tag{1.54}$$

Для потенциала Фирсова имеем

$$\chi(r) = \chi_{TF}(r/a) = \chi \left[\left(Z_1^{1/2} + Z_2^{1/2} \right)^{2/3} \frac{r}{a} \right], \tag{1.55}$$

$$V(r) = \frac{Z_1 Z_2 \epsilon^2}{r} \chi \left[\left(Z_1^{1/2} + Z_2^{1/2} \right)^{2/3} \frac{r}{a} \right], \tag{1.56}$$

где $\chi \left[\left(Z_1^{1/2} + Z_1^{1/2} \right)^{2/3} \frac{r}{a} \right]$ является экранирующей функцией.

Вторым представляющий интерес потенциалом является потенциал с двумя центрами Томаса — Ферми — Дирака (ТФД). Статистическая модель атома ТФД использовалась для вычисления потенциала из первых принципов. Как следствие, этот потенциал принимает во внимание, что обменные эффекты происходят в местах с конечными границами, определяемыми значениями r_b , в пространстве распределения электронного облака плотностью ρ_e . Полученный потенциал для подобных атомов имеет вид

$$\bar{V}(r) = \frac{Z^2 \epsilon^2}{r} \chi \left(Z^{1/3} \frac{r}{a} \right) - \alpha Z + \bar{\Lambda}, \tag{1.57}$$

где $\alpha \cong 3,16 \cdot 10^{-3} \epsilon^2 / a_0$ и $\bar{\Lambda}$ — ряд интегралов по точным плотностям единичных центров электронов.

Вычисления с использованием этого потенциала показали, что для очень малых расстояний (менее чем $\sim 0,3a_0$) $V(r)$ хорошо согласуется с другими теоретическими кривыми и с экспериментом, в то время как в диапазоне $\sim 0,3a_0 - 3a_0$ $V(r)$ лучше согласуется с другими теоретическими расчетами и результатами эксперимента, чем с экранированным потенциалом Кулона или потенциалом Фирсова [7].

При выборе соответствующего потенциала для определенного случая столкновений диапазон расстояний, разделяющих атомы, можно определить, приравняв имеющееся в распоряжении значение кинетической энергии к потенциалу и затем рассчитав наименьшее расстояние между атомами. Необходимое расчетное время взаимодействия также может быть определено. Для определения времени взаимодействия металлических атомов при низких кинетических энергиях, от 10^{-1} до 10^3 эВ, достаточно иметь только один потенциал Борна — Майера с константами, приведенными в уравнении (1.50). Для случаев столкновений атомов в каскаде с энергиями от 10^3 до 10^5 эВ чрезвычайно удобен обратный потенциал энергии. Такой потенциал может быть получен с использованием функции C/r^s к одной из вышеупомянутых потенциальных функций в ограниченном диапазоне r . Например, функция может соответствовать обратно пропорциональному квадрату ($s = 2$) экранированного потенциала Кулона при $r = a$, имея те же самые наклон, ординату и кривизну. Эта функция имеет вид [13]

$$V(r) = \frac{Z_1 Z_2 \epsilon^2 a}{r^2} e^{-1}. \quad (1.58)$$

Для ограниченного диапазона r может использоваться приближенный потенциал. Используя в уравнении (1.49) значение a , получим

$$V(r) = \frac{2E_R}{e} (Z_1 Z_2)^{5/6} \left(\frac{a_0}{r} \right)^2. \quad (1.59)$$

Удобным вариантом численного вычисления служит факт, что $2E_R/e \cong 10$ эВ,

$$V(r) = 10 (Z_1 Z_2)^{5/6} \left(\frac{a_0}{r} \right)^2 \text{ эВ}. \quad (1.60)$$

Этот потенциал можно использовать при облучении тяжелыми ионами с энергиями в диапазоне $10^3 - 10^5$ эВ. Для случая легких ионов с высо-

кой энергией, например протонов 5 МэВ, достаточен простой потенциал Кулона.

В табл. 1.3 суммированы различные функции потенциалов и области их применения. Но как следует выбирать функцию потенциала? Как определять, например, константы A и B в потенциале Борна — Майера для определенного элемента? Так как потенциал Борна — Майера пригоден для малых смещений из положения равновесия (то есть r_e), мы можем определить эти константы по измеренным объемным свойствам тела, например сжимаемости, упругим модулям и т. д. Если мы расширим потенциал $V(r)$ до $V_0 + \left(\frac{dV}{dr}\right)_0 r + 1/2 \left(\frac{d^2V}{dr^2}\right)_0 r^2 + \dots$, то тогда коэффициент $\left(\frac{d^2V}{dr^2}\right)_0$ определяет значение кривизны функции энергии от расстояния при $r = r_e$ (см. рис. 1.8).

Как узнать, что данный потенциал пригоден или описывает взаимодействие не должным образом в области r ? Мы можем это проверить путем измерения рассеяния или радиуса ионов в твердых телах. Так как $V(r)$ описывает природу столкновений, то это также подскажет нам о зависимости $\sigma_s(E_i)$, которая может быть определена из экспериментов по рассеянию. Кроме того, измерение диапазона рассеяния дает хорошую возможность определить количество столкновений, приведших к конечному месторасположению иона. Оба набора этих экспериментов дадут информацию об адекватности выбранной функции потенциала для точного описания взаимодействия атомов в твердом теле.

Определив возможности оценок взаимодействия нейтральных атомов или атомов с ионами, мы теперь подготовлены к описанию различных столкновений, которые до определенной степени подобны другим видам взаимодействия, весьма отличающимся от нейтронно-ядерных столкновений. Рассмотренный формализм предоставляет инструментарий для определения передаваемой энергии от падающей частицы к атому отдачи наряду с оценкой поперечного сечения переноса энергии. Следующие решения описаны в работах Томпсона [13].

1.2.2. Кинематика столкновений

Орбиты двух сталкивающихся атомов массой M_1 и M_2 относительно центра масс показаны на рис. 1.10. Местоположения частиц более удобно обозначить в полярных координатах (r_1, ψ) и (r_2, ψ) с массами M_1 и M_2 соответственно. Параметрами воздействия b , ψ являются угол рассеяния

Таблица 1.3. Сводка функций потенциалов

Потенциал	Уравнение для $V(r) =$	Область применения	Определения	Уравнения в тексте
Твердые сферы	0 для $r > r_0$ ∞ для $r < r_0$	$10^{-1} < T < 10^3$ эВ	$r_0 =$ размер атома	(1.46)
Борн — Майер	$V(r) = A \exp(-r/B)$	$10^{-1} < T < 10^3$ эВ $a_0 < r \leq r_e$	A, B вычислены по упругим значениям модуля	(1.47)
Простой потенциал Кулона	$\frac{Z_1 Z_2 \epsilon^2}{r}$	Легкие ионы высоких энергий $r \ll a_0$		(1.48)
Экранированный потенциал Кулона	$\left(\frac{Z_1 Z_2 \epsilon^2}{r} \right) \exp(-r/a)$	Легкие ионы $r < a_0$	$a_0 =$ радиус Бора $a =$ экранированный радиус	(1.49)
Брикман I	$\frac{Z^2 \epsilon^2}{r} e^{-r/a} \left(1 - \frac{r}{2a} \right)$	$r < a$	$a \equiv a_0 / Z^{1/3}$	(1.51)
Брикман II	$\frac{AZ_1 Z_2 \epsilon^2 \exp(-Br)}{1 - \exp(-Ar)}$	$Z > 25$ $r < 0,7r_e$	$A = \frac{0,95 \cdot 10^{-6}}{a_0} Z_{эфф}^{7,6}$ $B = Z^{1/3} / C a_0$ $C \equiv 1,5$	(1.52)
Фирсов	$\frac{Z_1 Z_2 \epsilon^2}{r} \chi \left[\frac{(Z_1^{1/2} + Z_2^{1/2})^2 r}{a} \right] a$	$r \leq a_0$	$\chi =$ экранированная функция	(1.56)
ТФД два центра	$\frac{Z^2 \epsilon^2}{r} \chi \left(Z^{1/3} \frac{r}{a} \right) - \alpha Z + \bar{\chi}$	$r < r_b (3a_0)$	$r_b =$ радиус исчезновения плотности электронного облака	(1.57)
Экранированный радиус	$\frac{2E_i}{e} (Z_1 Z_2)^{5/6} \left(\frac{a_0}{r} \right)^2$	$a/2 < r < 5a$	$E_i =$ энергия Ридберга = 13,6 эВ	(1.59)

пораженного атома отдачи в лабораторной системе и асимптотический угол рассеяния ϕ , когда межчастичные расстояния приближаются к бесконечности. Параметр воздействия определяется расстоянием между асимптотическими траекториями столкнувшихся частиц, как показано на рис. 1.10. Нас интересует возможность определять детальные орбиты, выражая ϕ в зависимости от b . Этот результат тогда будет использован для определения поперечного сечения рассеяния.

Радиальная и поперечная скорости массы M_1 на расстояниях \dot{r}_1 и $r_1\dot{\psi}$ в полярных координатах позволяют получить результирующую скорость $(\dot{r}_1^2 + r_1^2\dot{\psi}^2)^{1/2}$. Скоростные компоненты те же, что для массы M_2 , с заменой подстрочного индекса 2 на 1. Сохранение энергии требует, чтобы полная энергия любой системы оставалась постоянной. Энергия в лабораторной системе координат только $E_i = \frac{1}{2}M_1v_i^2 = E_T$. Напомним, что $V_{\text{CM}} = \frac{M_1}{M_1 + M_2}v_i$, кинетическая энергия в системе центра масс идентична в лабораторной системе:

$$E_{\text{CM}} = \frac{1}{2}(M_1 + M_2)V_{\text{CM}}^2 = \left(\frac{M_1}{M_1 + M_2}\right)E_i.$$

Следовательно, энергия в системе CM, доступная для преобразования, являясь полной кинетической энергией без энергии движения системы CM,

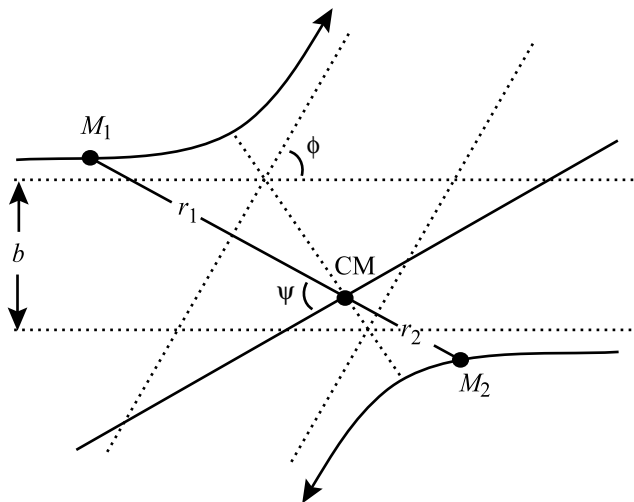


Рис. 1.10. Орбиты столкновения в системе центра масс

$$E = E_T - E_{\text{CM}} = E_i - E_{\text{CM}} = E_i \left(\frac{M_2}{M_1 + M_2} \right). \quad (1.61)$$

При упругом соударении сумма потенциальных и кинетических энергий в любой точке орбиты должна равняться асимптотической сумме кинетических энергий

$$E_i \left(\frac{M_2}{M_1 + M_2} \right) = \frac{1}{2} M_1 (\dot{r}_1^2 + r_1^2 \dot{\psi}^2) + \frac{1}{2} M_2 (\dot{r}_2^2 + r_2^2 \dot{\psi}^2) + V(r_1 + r_2). \quad (1.62)$$

асимптот. энергия; сумма кинетич. энергии в любой точке орбиты; потенциальная энергия

Считая, что $r = r_1 + r_2$ представляет полное расстояние между атомами $r_1 = M_2 / (M_1 + M_2)$; $r_2 = M_1 / (M_1 + M_2)$ и соотношение энергий в уравнении (1.62) может быть упрощено:

$$\eta E_i = \frac{1}{2} \mu (\dot{r}^2 + r^2 \dot{\psi}^2) + V(r), \quad (1.63)$$

где

$$\eta = \frac{M_2}{M_1 + M_2} \quad \text{и} \quad \mu = \frac{M_1 M_2}{M_1 + M_2}$$

представляют собой приведенные массы.

Закон сохранения момента импульса требует, чтобы его значение в любой точке орбиты равнялось асимптотическому значению. Напомним, что:

$$v_1 = v_\ell - V_{\text{CM}} = v_\ell \left(\frac{M_2}{M_1 + M_2} \right) \quad \text{и} \quad V_2 = V_{\text{CM}} = v_\ell \left(\frac{M_1}{M_1 + M_2} \right),$$

так, чтобы асимптотическое значение момента импульса могло быть

$$M_1 v_1 b_1 + M_2 v_2 b_2 = \frac{M_1 M_2}{M_1 + M_2} v_\ell (b_1 + b_2) = \mu b v_\ell. \quad (1.64)$$

Момент импульса в любой точке равен

$$M_1 r_1^2 \dot{\psi} + M_2 r_2^2 \dot{\psi} = \left[M_1 \left(\frac{M_2}{M_1 + M_2} r \right)^2 + M_2 \left(\frac{M_1}{M_1 + M_2} r \right)^2 \right] \dot{\psi} = \mu r^2 \dot{\psi}, \quad (1.65)$$

следовательно,

$$\mu r^2 \dot{\psi} = \mu b v_\ell. \quad (1.66)$$

Заменяя выражение (1.66) в уравнении (1.63) для исключения $\dot{\psi}$ и определения \dot{r} , получаем

$$\dot{r} = \left(\frac{2}{\mu}\right)^{1/2} \left[\eta E_i \left(1 - \frac{b^2}{r^2}\right) - V(r) \right]^{1/2}. \quad (1.67)$$

Следующий шаг вычислений имеет следующий вид. Умножив члены уравнения (1.63), получим

$$\eta E_i - \frac{1}{2} \mu \dot{r}^2 = \frac{1}{2} \mu \frac{v_\ell^2 b^2}{r^2} + V(r)$$

и после преобразований имеем

$$\eta E_i - \frac{1}{2} \mu \frac{v_\ell^2 b^2}{r^2} = \frac{1}{2} \mu \dot{r}^2 + V(r). \quad (1.68)$$

Напомним, что $E_i = 1/2 M_1 v_\ell^2$ и поэтому $v_\ell^2 = 2E_i/M_1$, и мы можем исключить v_ℓ , так, чтобы второй член в левой части уравнения (1.68) стал $-\frac{\mu b^2 E_i}{M_1 r^2}$:

$$\mu = \frac{M_1 M_2}{M_1 + M_2} \quad \text{и} \quad \mu/M_1 = \eta,$$

$$\eta E_i - \eta E_i \frac{b^2}{r^2} = \frac{\mu \dot{r}^2}{2} + V(r) \quad \text{и} \quad \eta E_i \left(1 - \frac{b^2}{r^2}\right) = \frac{\mu \dot{r}^2}{2} + V(r),$$

или

$$\dot{r} = \left(\frac{2}{\mu}\right)^{1/2} \left[\eta E_i \left(1 - \frac{b^2}{r^2}\right) - V(r) \right]^{1/2},$$

что является тем же, что и в уравнении (1.67). Заметим, что r становится минимальным при $\dot{r} = 0$. В этом случае имеем

$$V(\rho) = \eta E_i \left(1 - \frac{b^2}{\rho^2}\right), \quad (1.69)$$

и $V_{\max} = \eta E_i$ (при $b = 0$) представляет «лобовое» столкновение. Так, если частица ударяет атом мишени равной массы, то $V_{\max} = 1/2 E_i$. Когда $r \rightarrow \infty$, то

$$V(r) \rightarrow 0 \quad \text{и} \quad \dot{r}^2 = \left(\frac{2}{\mu}\right) \eta E_i, \quad \text{или} \quad \dot{r}^2 = 2E_i/M_1, \quad E_i = 1/2 M_1 \dot{r}^2$$

$$(\dot{r} = v_\ell \text{ at } r \rightarrow \infty), \Rightarrow E_i = 1/2 M_1 v_\ell^2.$$

Напомним, что мы ищем ϕ в функции b . Возвратившись к (1.67) и поделив \dot{r} в уравнении (1.67) на $\dot{\psi}$ из (1.66), имеем

$$\frac{\dot{r}}{\dot{\psi}} = \frac{dr}{d\psi} = -\left(\frac{2}{\mu}\right)^{1/2} \left[\mu E_i \left(1 - \frac{b^2}{r^2}\right) - V(r) \right]^{1/2} \frac{r^2}{v_\ell b}. \quad (1.70)$$

Знак «минус» перед значением правой части равенства приведен потому, что для первой половины орбиты \dot{r} уменьшается с увеличением ψ . После преобразований получим

$$\frac{dr}{d\psi} = -\frac{1}{v_\ell b} \left(\frac{2}{\mu}\right)^{1/2} \left[\mu E_i (r^4 - r^2 b^2) - r^4 V(r) \right]^{1/2}. \quad (1.71)$$

Разделив выражение под квадратным корнем на $\eta E_i b^2$, имеем

$$\frac{dr}{d\psi} = -\frac{1}{v_\ell b} \left(\frac{2}{\mu}\right)^{1/2} (\eta E_i)^{1/2} b \left[\frac{r^4}{b^2} \left(1 - \frac{V(r)}{\eta E_i}\right) - r^2 \right]^{1/2}. \quad (1.72)$$

Так как $1/2 M_1 v_\ell^2 = E_i$, тогда $v_\ell = (2E_i/M_1)^{1/2}$, и, заменив v_ℓ , получим

$$\begin{aligned} \frac{dr}{d\psi} &= -\left(\frac{2}{\mu} \frac{M_1}{2E_i} \eta E_i\right)^{1/2} \left[\frac{r^4}{b^2} \left(1 - \frac{V(r)}{\eta E_i}\right) - r^2 \right]^{1/2} = \\ &= \left(\frac{M_1}{\mu} \eta\right)^{1/2} \left[\frac{r^4}{b^2} \left(1 - \frac{V(r)}{\eta E_i}\right) - r^2 \right]^{1/2} = -\left[\frac{r^4}{b^2} \left(1 - \frac{V(r)}{\eta E_i}\right) - r^2 \right]^{1/2}. \end{aligned} \quad (1.73)$$

Замена $x = 1/r$ приведет к следующему:

$$\frac{dx}{d\psi} = \left[\frac{1}{b^2} \left(1 - \frac{V(x)}{\eta E_i}\right) - x^2 \right]^{1/2}. \quad (1.74)$$

Это есть уравнение орбиты ($\psi = f(x)$).

Угол рассеяния ϕ определим, выразив $d\psi$ через x и dx и интегрируя в соответствующих пределах от $x = 0$ до $1/\rho$. Этими пределами являются, как показано на рис. 1.10, соответственно $\phi/2$ и $\pi/2$. Проведя интегрирование для первой половины орбиты, получаем

$$\int_{\phi/2}^{\pi/2} d\psi = \int_0^{1/\rho} \left[\frac{1}{b^2} \left(1 - \frac{V(x)}{\eta E_i}\right) - x^2 \right]^{-1/2} dx \quad (1.75)$$

и

$$\phi = \pi - 2 \int_0^{1/\rho} \left[\frac{1}{b^2} \left(1 - \frac{V(x)}{\eta E_i}\right) - x^2 \right]^{-1/2} dx. \quad (1.76)$$

Число ρ в верхнем пределе x обозначает r , когда $\psi = \pi/2$ и, следовательно, представляет наибольшее сближение. Так как $dx/d\psi = 0$, то при $\psi = \pi/2$ для ρ из уравнения (1.74) имеем

$$\eta E_i = \frac{V(\rho)}{1 - \frac{b^2}{\rho^2}}. \quad (1.77)$$

Уравнения (1.76) и (1.77) обеспечивают связь между ψ и b .

Мы должны все же определить поперечное сечение для нашего случая рассеяния. Это может быть сделано следующим образом. Если частицы M_1 бомбардируют атом мишени M_2 (см. рис. 1.11), то ионы, которые пересекают область $2\pi b db$ проложенными кругами радиусов b и $b + db$, будут рассеяны в пространстве $d\phi$ около угла ϕ . Так как отношение между db и $d\phi$ может быть получено из уравнения (1.76), дифференциальное поперечное сечение будет

$$\sigma(E_i, T) dT = 2\pi b db \quad \text{и} \quad \sigma(E_i, T) = 2\pi b \frac{db}{d\phi} \frac{d\phi}{dT}. \quad (1.78)$$

Знание $V(r)$ позволяет написать ϕ в терминах b^2 , используя уравнение (1.76), и затем в терминах T , используя уравнение (1.13). Дифференцирование приводит к выражению $2\pi b db$ в функции T и dT . Затем из уравнения (1.78) будет получено дифференциальное поперечное сечение для столкновений с энергиями отдачи dT вблизи T . Полное поперечное сечение для столкновений с T в любой точке диапазона от \check{T} до γE_i запишется как

$$\sigma(E_i) = \int_{\check{T}}^{\gamma E_i} \sigma(E_i, T) dT. \quad (1.79)$$

Поэтапный процесс определения энергии поперечного сечения проходит следующим образом:

1. Выбрать потенциальную функцию $V(r)$.
2. Использовать (1.76), чтобы получить b в функции ϕ , $b = f(\phi)$.
3. Использовать (1.13) для расчета ϕ в функции T , $\phi = g(T)$.
4. Использовать зависимость между b и ϕ , между ϕ и T в (1.78), чтобы получить поперечное сечение передачи энергии.

Предыдущее описание расчета поперечного сечения переноса энергии подчеркивает важность знания функций потенциала, описывающих специфическое взаимодействие иона с атомом или атома с атомом. Без точного знания функции потенциала дальнейшее описание процесса столкновения и последующей структуры дефектов становится невозможным. К сожалению, явная оценка интеграла в уравнении (1.76) воз-

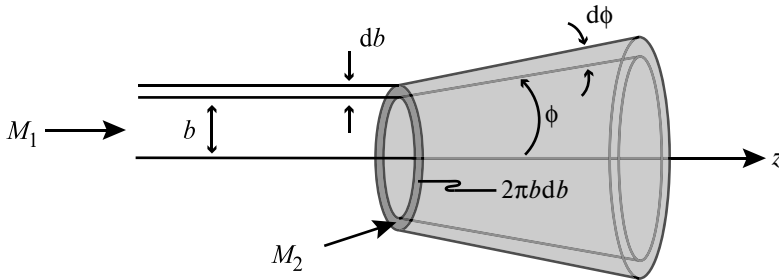


Рис. 1.11. Поперечное сечение рассеяния ионов в пересекающихся областях $2\pi b db$ в угловых значениях $d\phi$ от ϕ

можно только для простых потенциальных функций. Перед дальнейшим рассмотрением различных функций потенциала и их применением для определения энергии поперечного сечения переноса необходимо сначала рассмотреть возможные классы ионов и их соответствующих энергий.

Классификация ионов

Существует три важных класса ионов при рассмотрении столкновений ионов с атомами. Первый класс — легкие ионы с энергией $E_i > 1$ МэВ. Второй — тяжелые ионы с очень высокой энергией ($E_i \sim 10^2$ МэВ), подобные осколкам деления ($M \sim 10^2$). Третий класс — тяжелые ионы с более низкой энергией, получаемые в ускорителях, или ионы, которые могут появиться в результате высокоэнергетических соударений с первично выбитыми атомами. Энергия этих ионов обычно меньше 1 МэВ.

Для каждого вида взаимодействия необходимо выбрать соответствующую функцию потенциала. Удобной для такого выбора становится зависимость, представляющая отношение ρ/a расстояния сближения частиц к экранированному радиусу в зависимости от передаваемой энергии T . Для выбора соответствующего потенциала на рис. 1.12 изображены приблизительные зависимости ρ от T . Представлены три кривые с ранее обсужденными ионами трех классов: (1) 20 МэВ протоны, (2) 70 МэВ осколки деления и (3) 50 кэВ ионы меди. Кривая столкновений (1) относится к режиму, где $\rho \ll a$ соответствует простому потенциалу Кулона. У кривой столкновения (2), представляющей лобовой удар, $\rho \ll a$ будет таким же. Но для косых ударов с $\rho \sim a$ будет более удобен экранированный потенциал Кулона. Кривая (3) представляет область, где $a < \rho \ll 5a$ и где уместно было бы применить обратную квадратную зависимость потенциала или потенциал Бринкмана, так как оба потенциала близки к зависимостям Борна — Майера и экранированного Кулона.

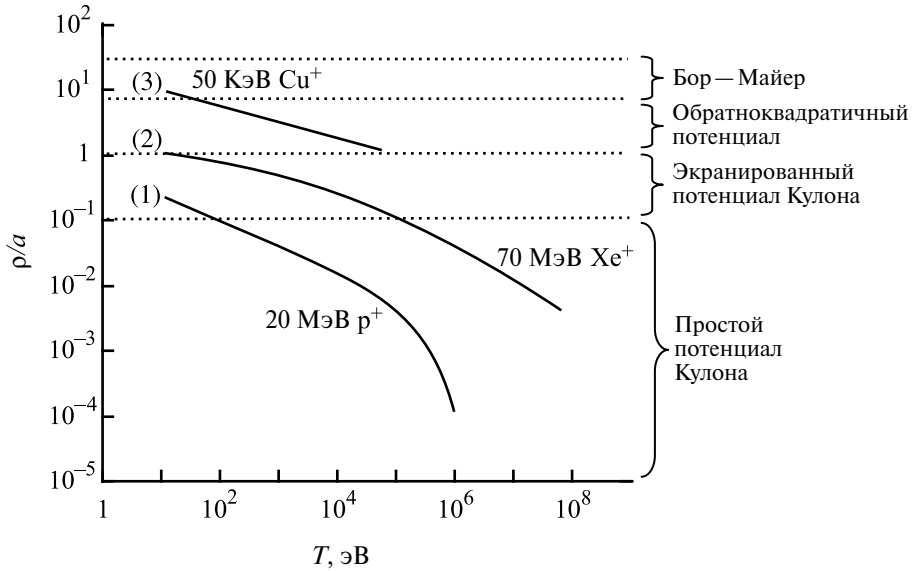


Рис. 1.12. Наименьшее относительное значение расстояния ρ/a в зависимости от энергии T для (1) протонов 20 МэВ в Cu, (2) 70 МэВ ионов Xe^+ в Cu и (3) 50 кэВ Cu^+ атомов отдачи ([12])

Соударение твердых сфер

Потенциал соударений твердых сфер соответствует энергиям иона немного ниже 50 кэВ и близок к энергиям лобовых упругих соударений. Здесь $\rho \sim r_c$ и атомы будут вести себя, как твердые сферы. В лобовом столкновении $b = 0$ из уравнением (1.77) мы имеем

$$\eta E_i = V(\rho). \tag{1.80}$$

Когда b отлично от нуля, то столкновение может быть изображено схемой рис. 1.13, где мы определяем $R_1 = \rho \frac{M_2}{M_1 + M_2}$ и $R_2 = \rho \frac{M_1}{M_1 + M_2}$. Если ρ известно, то тогда из рисунка следует

$$b = \rho \cos \frac{\phi}{2}. \tag{1.81}$$

Теперь напомним, что

$$\sigma_s(E_i, T) dT = 2\pi b db.$$

Используя абсолютное значение производной $\frac{db}{d\phi}$ как положительную величину, получим

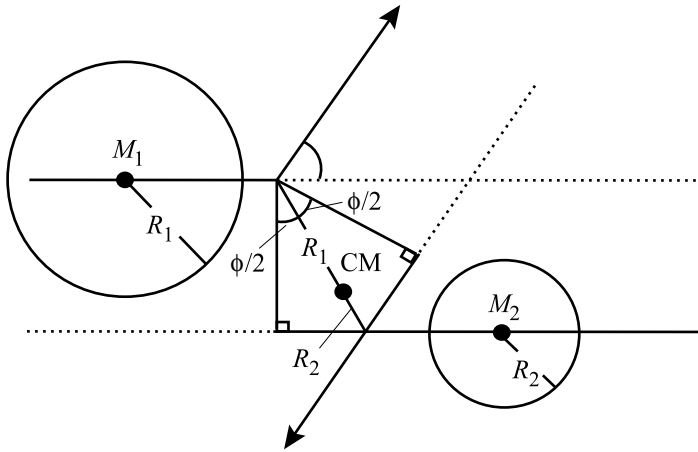


Рис. 1.13. Столкновение атомов по схеме соударения твердых сфер

$$\sigma_s(E_i, T) = 2\pi b \frac{db}{d\phi} \frac{d\phi}{dT}, \quad (1.82)$$

где $\frac{db}{d\phi} = 1/2\rho \sin\phi/2$ из $b = \rho \cos\phi/2$ и $\frac{d\phi}{dT} = \frac{2}{\gamma E_i \sin\phi}$ из $T = \frac{\gamma E_i}{2}(1 - \cos\phi)$,

$$\sigma(E_i, T) = 2\pi\rho \cos\phi/2 \frac{2}{\gamma E_i \sin\phi},$$

$$\sigma_s(E_i, T) = \frac{\pi\rho^2}{\gamma E_i}. \quad (1.83)$$

Напомним, что для нейтронно-ядерных взаимодействий $\sigma_s(E_i, T) = \sigma_s(E_i)/\gamma E_i$. Используя это соотношение, мы можем получить представление о размере поперечного сечения переноса энергии при нейтронно-ядерных взаимодействиях по результатам соударения атома с атомом:

$$\frac{\sigma(E_i, T)^{a-a}}{\sigma(E_i, T)^{n-nuclear}} = \frac{\pi\rho^2}{\sigma_s(E_i)} \sim \frac{\pi(10^{-8})^2}{10^{-24}} \sim 10^8.$$

Эта энергия взаимодействия приблизительно на восемь порядков больше, чем при нейтронно-ядерных взаимодействиях.

Полное поперечное сечение рассеяния равно

$$\sigma_s(E_i) = \int_{\bar{T}}^{\gamma E_i} \sigma_s(E_i, T) dT = \int_{\bar{T}}^{\gamma E_i} \frac{\pi\rho^2}{\gamma E_i} dT = \frac{\pi\rho^2}{\gamma E_i} [\gamma E_i - \bar{T}] = \pi\rho^2. \quad (1.84)$$

Отметим, что $\sigma_s(E_i)$ независимо от E_i (потому что $\rho \neq f(E_i)$) и что $\sigma_s(E_i, T) \propto 1/E_i$ независимо от T . Мы можем найти $\sigma_s(E_i, T)$ явным образом, приме-

нив соответствующую функцию потенциала для нахождения значения ρ из $V(r)$. Возвратимся к рассмотрению столкновений в разделе 1.2.1, когда параметр взаимодействия находится на уровне равновесного разделения атомов, самым приемлемым будет потенциал Борна — Майера с энергиями около 10 кэВ (Это означает, что мы отходим от представлений чистой модели твердых сфер.) Следовательно, мы должны использовать зависимость $V(r) = A \exp(-r/B)$, где A и B определяются уравнением (1.47). Используя уравнение (1.80), приходим к виду

$$V(\rho) = A \exp(-\rho/B) = \eta E_i \quad (1.85)$$

или

$$\rho = B \ln \left(\frac{A}{\eta E_i} \right). \quad (1.86)$$

Так как $b = \rho \cos \phi/2 = B \ln(A/\eta E_i) \cos \phi/2$, поперечное сечение переноса энергии равно

$$\sigma_s(E_i, T) = \frac{\pi B^2}{\gamma E_i} \left[\ln \frac{A}{\eta E_i} \right]^2. \quad (1.87)$$

Полное поперечное сечение рассеяния предстает тогда в виде интеграла поперечного сечения переноса энергии с пределами \check{T} и γE_i

$$\sigma_s(E_i) = \int_{\check{T}}^{\gamma E_i} \pi B^2 \left[\ln \frac{A}{\eta E_i} \right]^2 \frac{1}{\gamma E_i} dT. \quad (1.88)$$

Из этого выражения мы можем вычислить значения полного поперечного сечения рассеяния для всех допустимых T . Отметим, что полное поперечное сечение рассеяния зависит от E_i . Кроме того, типичные значения A , B и \check{T} (25 эВ), значение $\sigma_s(E_i)$ при взаимодействии атома с атомом приблизительно в 10^8 раз больше, чем при нейтронно-ядерных соударениях.

Рассеяние Резерфорда

Обратимся теперь ко второму примеру использования чистого потенциала рассеяния Кулона, чтобы продемонстрировать резерфордовское рассеяние. По нашей классификации ионов по энергии и массе первый вид столкновений соответствует ($m \sim 1$ до 4) и энергиям ионов ($E > \text{МэВ}$), где $\rho \ll a$. Столкновения такого вида соответствуют простому потенциалу Кулона, представленному уравнением (1.48)

$$V(r) = \frac{Z_1 Z_2 \varepsilon^2}{r}.$$

Предположим, что Z_1 и Z_2 представляют ядерные заряды и что столкновение происходит при высоких энергиях так, что электроны удалены с ядер и взаимодействие существует только между ядрами.

В нашем описании траекторий частиц в системе СМ мы нашли, что в случае наибольшего сближения $dx/d\psi = 0$ и из уравнения (1.77) получим

$$\eta E_i = \frac{V(\rho)}{1 - \frac{b^2}{\rho^2}}.$$

Замена $V(r)$ приводит к следующему:

$$\frac{Z_1 Z_2 \varepsilon^2}{\rho} = \eta E_i \left(1 - \frac{b^2}{\rho^2} \right). \quad (1.89)$$

Определяя

$$b_0 = \left(\frac{Z_1 Z_2 \varepsilon^2}{\eta E_i} \right), \quad (1.90)$$

получим

$$\frac{b_0}{\rho} = 1 - \frac{b^2}{\rho^2} \quad (1.91)$$

и

$$\rho = b_0 \left[1 + \left(1 + \frac{4b^2}{b_0^2} \right)^{1/2} \right]. \quad (1.92)$$

Следовательно, наименьшее расстояние является функцией параметра взаимодействия b . Для лобовых столкновений $b = 0$ и минимальное значение ρ зависит от E_i

$$\rho(b=0) = \rho_0 = b_0 = \frac{Z_1 Z_2 \varepsilon^2}{\eta E_i}. \quad (1.93)$$

Отметим, что для этого типа столкновения ρ зависит от E_i , в отличие от независимости от E_i в модели твердых сфер. Возвращаясь к орбитальному уравнению (1.75), оценим теперь его с помощью определенного интеграла

$$\int_{\pi/2}^{\phi/2} d\psi = \int_{1/\rho}^0 \left[\frac{1}{b^2} - \frac{b_0}{b^2} x - x^2 \right]^{-1/2} dx. \quad (1.94)$$

Так как $\psi = \pi/2$ при $r = \rho$ ($x = 1/\rho$) и $\psi = \phi/2$ при $r = \infty$ ($x = 0$), то при $y = x + b_0/2b^2$ получим

$$\frac{\phi}{2} - \frac{\pi}{2} = \int_{\frac{1}{\rho} + \frac{b_0}{2b^2}}^{\frac{b_0}{2b^2}} [c^2 - y^2]^{-1/2} dy, \quad (1.95)$$

где $c^2 = (1/b^2 + b_0^2/4b^4)$. Тогда орбиты будут равны

$$\frac{\phi}{2} - \frac{\pi}{2} = \left[\sin^{-1} \frac{y}{c} \right]_{\frac{1}{\rho} + \frac{b_0}{2b^2}}^{\frac{b_0}{2b^2}} = \sin^{-1} \frac{b_0}{2b^2} - \sin^{-1} \frac{1}{c} \left(\frac{1}{\rho} + \frac{b_0}{2b^2} \right). \quad (1.96)$$

Так как

$$\sin^{-1} \frac{1}{c} \left(\frac{1}{\rho} + \frac{b_0}{2b^2} \right) = \sin^{-1}(1) = \pi/2,$$

то

$$\sin \phi/2 = \frac{b_0}{2b^2 c}. \quad (1.97)$$

Заменяя c из уравнения (1.97), получим

$$\sin^2 \phi/2 = \frac{1}{1 + \frac{4b^2}{b_0^2}}. \quad (1.98)$$

Используя тригонометрические соотношения для $\sin^2 \phi/2$, найдем

$$b = \frac{b_0}{2} \cot \phi/2. \quad (1.99)$$

Теперь мы имеем зависимость между параметром воздействия b и асимптотическим углом рассеяния ϕ . Отметим, что b есть функция E_i через b_0 (уравнение (1.93)).

Далее мы хотим получить выражение для поперечного сечения рассеяния. Используя уравнение (1.82) для $\sigma_s(E_i, T)$, получаем

$$\sigma_s(E_i, T) dT = \sigma_s(E_i, \phi) d\Omega = 2\pi b db = \pi b_0 \cot \frac{\phi}{2} db, \quad (1.100)$$

и, подставив db из уравнения (1.99), имеем

$$\sigma_s(E_i, T) = \left(\frac{b_0}{4} \right)^2 \frac{1}{\sin^4(\phi/2)}, \quad (1.101)$$

что является обратным законом Резерфорда рассеяния четвертой степени. Поперечное сечение для атомов отдачи идентично и для упругих соударений (1.13) и, следовательно,

$$\sigma_s(E_i, T) = \sigma_s(E_i, \phi) \frac{d\Omega}{dT}$$

или

$$\sigma_s(E_i, T) = \frac{\pi b_0^2 \gamma E_i}{4 T^2}. \quad (1.102)$$

Отметим, что в отличие от нейтронно-ядерных столкновений и рассеяния твердых сфер поперечное сечение рассеяния Резерфорда находится в сильной зависимости от T . Это выражение также показывает, что поперечное сечение рассеяния $\sigma_s(E_i, T) \rightarrow \infty$ при $T \rightarrow 0$. Но это только отражает факт, что при $\phi \rightarrow 0$ и $b \rightarrow \infty$ потенциал Кулона представляет зависимость для диапазона больших расстояний. В действительности существует резкий спад b и, следовательно, ϕ за счет электронного экранирования. Как видно будет далее, этот спад связан с энергией смещения E_d , представляющей среднее значение переданной энергии

$$\bar{T} = \frac{\int_{\check{T}}^{\hat{T}} T \sigma_s(E_i, T) dT}{\int_{\check{T}}^{\hat{T}} \sigma_s(E_i, T) dT} = \frac{\check{T} \ln(\hat{T} / \check{T})}{1 - \frac{\check{T}}{\hat{T}}}. \quad (1.103)$$

Для $\hat{T} = \gamma E_i$ и $\check{T} = E_d$ и так как $\gamma E_i \gg E_d$, то

$$\bar{T} \approx E_d \ln \left(\frac{\gamma E_i}{E_d} \right), \quad (1.104)$$

что является весьма низким значением для всех энергий E_i , отражая сильную зависимость $1/T^2$ по уравнению (1.102).

Интеграл уравнения (1.102) по T дает полное поперечное сечение для случая смещения ионов с энергий E_i

$$\sigma_s(E_i) = \frac{\pi}{4} b_0^2 \hat{T} \int_{E_d}^{\hat{T}} \frac{dT}{T^2} = \frac{\pi b_0^2}{4} \left(\frac{\hat{T}}{E_d} - 1 \right), \quad (1.105)$$

и так как при высоких энергиях $\hat{T}/E_d \gg 1$, то для $\hat{T} = \gamma E_i$ имеем

$$\sigma_s(E_i) \approx \frac{\pi b_0^2 \gamma E_i}{4 E}, \quad (1.106)$$

что представляет весьма большую величину.

Возникающий при рассмотрении вышеупомянутых явлений вопрос заключается в определении условий применения потенциала рассеяния Резерфорда. Ответ должен быть связан с определением, какая основная часть рассеяния во время столкновения произошла в диапазоне расстояний $r \ll a$. Но это будет лишь качественной оценкой. Для количественного определения необходимо рассмотреть два случая.

Случай 1: столкновения, близкие к «лобовым», с высокой энергией T .

Для близкого к лобовому столкновению с $\rho_0 \ll a$ или $E_i \gg E_a$, когда E_a могло бы принять значение E_i при $\rho_0 = a$, экранированный потенциал Кулона имеет вид

$$E_a = 2E_R(Z_1Z_2)^{7/6}(M_1 + M_2)/(M_2e), \quad (1.107)$$

который получен после перенормировки экранированного потенциала Кулона (уравнение (1.49)) в форме обратно квадратичной зависимости (1.59) с $\epsilon^2 = 2a_0E_R$ и после приравнивания $r = a$ и использования зависимости для лобового столкновения $V(r) = \eta E_i = [M_2/(M_1 + M_2)]E_i$.

Случай 2: косые удары (низкое T).

Здесь рассматриваются только те столкновения, у которых $b \leq a$ или в результате которых перенос энергии $\check{T} \sim E_d$ при $b = a$. Для простых кулоновских столкновений с $b = a$ имеем из уравнений (1.98) и (1.13)

$$T = \frac{e^2\gamma E_a^2}{4E_i} \quad \text{или} \quad E_i = \frac{e^2\gamma E_a^2}{4T} \quad (1.108)$$

и, задав эту величину E_i и обозначив E_b при $T = \check{T}$, имеем

$$E_b = \frac{e^2\gamma E_a^2}{4\check{T}} \quad \text{где} \quad \check{T} = E_d, \quad (1.109)$$

и это уравнение действительно для всех $E_i \gg E_b$. По существу, E_b — это значение E_i , которое приводит к передаче энергии $T \geq E_d$ при $b = a$. Или иначе условия $E_b < E_i$, приводящие к значениям $T \ll \check{T}$, можно не принимать во внимание, так как $\rho \geq a$, и этими столкновениями можно пренебречь. В табл. 1.4 представлены примеры значений E_a и E_b при столкновениях различных частиц разной энергии с атомами мишени.

Из табл. 1.4, учитывая что $E_a < E_b$, мы можем принять, что E_i должно быть $\gg E_b$, чтобы достоверно описать рассеяние простым законом Кулона.

В итоге для столкновений, близких к лобовым, при $E_i \gg E_a$ можно использовать простой потенциал Кулона. Если $E_i \gg E_b$, то этот потенциал может использоваться для всех интересующих нас столкновений при оценке радиационных повреждений. Легкие заряженные частицы, такие как протоны и альфа-частицы с $E_i > 1$ МэВ, попадают в эту категорию, в то время как осколки деления находятся в режиме $E_a < E_i < E_b$ и у атомов отдачи $E_i \leq E_a$. Далее это будет обсуждено. Но сначала мы представляем пример рассеяния Резерфорда.

Таблица 1.4. Значения E_a и E_b для различных комбинаций атомов мишени и налетающих частиц [13]

Случайная частица	Норма атома	$E_a(eV)$	$E_b(eV)$
C	C	$2 \cdot 10^3$	$8 \cdot 10^5$
Al	Al	$1 \cdot 10^4$	$2 \cdot 10^7$
Cu	Cu	$7 \cdot 10^4$	$1 \cdot 10^9$
Au	Au	$7 \cdot 10^5$	$1 \cdot 10^{11}$
Xe	U	$5 \cdot 10^5$	$3 \cdot 10^{10}$
D^+	C	$1,5 \cdot 10^2$	$2 \cdot 10^3$
D^+	Cu	$1 \cdot 10^3$	$2 \cdot 10^4$
D^+	U	$4 \cdot 10^3$	$1 \cdot 10^5$

Пример 1.2. 2 МэВ протоны на алюминии.

Для этого случая имеем

$$\hat{T} = \gamma E_i = \frac{4(27)}{(27+1)^2} 2 \text{ МэВ} = 0,28 \text{ МэВ},$$

$$\check{T} = 25 \text{ эВ},$$

$$\bar{T} = E_d \ln \left(\frac{\gamma E_i}{E_d} \right) = 233 \text{ эВ}.$$

Мы можем также рассчитать соударения $E_a \sim 200$ эВ и $E_b \sim 4000$ эВ (для сравнения 2 МэВ He^+ — на Al, $E_a \sim 1$ кэВ и $E_b > 25$ кэВ). Также для 2 МэВ H^+ на Au, $E_a \sim 1,6$ кэВ и $E_b \sim 38$ кэВ и для 2 МэВ He^+ на Au, $E_a \sim 8$ кэВ и $E_b \sim 69$ кэВ. Начиная с $E_i \gg E_b$ для этих видов столкновений действителен простой закон Кулона. Поэтому $\sigma(E_i) \sim 4 \cdot 10^{-22} \text{ см}^2$, и так как средний свободный путь между столкновениями $\lambda = 1/\sigma N$ и $N \sim 6 \cdot 10^{22} \text{ а/см}^3$, то $\lambda \sim 0,04$ см или приблизительно 400 мкм, что почти в 10 раз больше длины пробега 2 МэВ протона в Al. Это означает, что в среднем только одно рассеивающее столкновение Резерфорда приходится на каждые 10 налетающих протонов на Al.

Далее исследуем другие классы столкновений ионов с атомами, таких как тяжелые ионы с большой энергией, тяжелые медленные ионы и высокоэнергетические электроны.

Тяжелые энергетические ионы

Для тяжелых энергетических ионов, таких как осколки деления, из рис. 1.12 следует, что потенциал должен соответствовать экранированному закону Кулона с отталкиванием закрытых оболочек. Рассмотрим сначала простой потенциал Кулона как грубое приближение, зная, что его использование оправдано только для энергий атомов отдачи, приближающихся к значению γE_i при $\rho \ll a$.

Напомним, что

$$\sigma(E_i) = \frac{\pi b_0^2}{4} \frac{\gamma E_i}{E_d} \quad \text{и} \quad b_0 \alpha \frac{Z_1}{\gamma E_i}, \quad \gamma = \frac{4M_1 M_2}{(M_1 + M_2)^2}, \quad \eta = \frac{M_2}{M_1 + M_2},$$

поперечное сечение по сравнению с σ_s для легких ионов резко возрастает:

$$\frac{\sigma_{\text{тяж}}}{\sigma_{\text{легк}}} = \frac{\left. \frac{z_1^2 M_1}{E_i} \right|_{\text{тяж}}}{\left. \frac{z_1^2 M_1}{E_i} \right|_{\text{легк}}} \approx 10^6$$

для осколков деления с выходом продуктов деления урана, $M_1^{\text{легк}} \approx 96$ аем (атомная единица массы), $E_1^{\text{легк}} \approx 95$ МэВ и $M_1^{\text{тяж}} \approx 137$ аем, $E_1^{\text{тяж}} \approx 55$ МэВ. По сравнению с соударением 2 МэВ протона с Al для осколков деления поперечное сечение в 10^4 раз больше! Поэтому их средний свободный путь пробега в 10^{-4} меньше, чем у протона в Al.

Напомним, что $\sigma(E_i, T)$ изменяется как $1/T^2$. Но это верно только при условии $\gamma E_i (\rho \ll a)$. При более низких энергиях экранирование уменьшает зависимость от энергии. Таким образом, для лучшего описания взаимодействия тяжелых ионов больших энергий с атомами мишени следует использовать выражение Бринкмана (уравнение (1.50)), которое при импульсном воздействии (см. [13]) приходит к виду

$$T = \frac{M_1}{M_2} \frac{A^2}{E_i} \left[F\left(\alpha, \frac{b}{B}\right) - (1-\alpha) F\left(1+\alpha, \frac{b}{B}\right) \right]^2,$$

где A, B даны в уравнении (1.50) и

$$F\left(\alpha, \frac{b}{B}\right) = \frac{b}{B} \int_{b/a}^{\infty} \frac{-e^{-x} dx}{(x^2 - b^2/a^2)^{1/2} (1 - e^{-ax})^2} = \frac{b}{B} \sum_{n=0}^{\infty} (n+1) K_0 \left\{ \frac{b}{B} (1+n\alpha) \right\}, \quad (1.111)$$

где $K_0(y)$ является функцией Бесселя мнимого аргумента. Член α представляет отношение потенциала Борна — Майера к экранированному потенци-

алу Кулона, как при $r = a$, так и вообще при $\alpha < 1$. T может быть найдено из b и уравнения (1.110). Дифференцирование приводит к значению $\sigma = 2\pi bdb$. Однако из-за сложности уравнения (1.110) требуется численное решение. Тем не менее можно вычислить число атомов отдачи dN от $(dT$ по $T)$, произведенное осколком деления при замедлении его до остановки:

$$dN = n\sigma dx = n \frac{d\sigma}{dT} \left(-\frac{dE}{dx} \right)^{-1} dE dT, \quad (1.112)$$

где n — плотность атомов и

$$N(T)dT = n \int_0^{E_i} \frac{\sigma}{dT} \left(\frac{dE}{dX} \right)^{-1} dE dT. \quad (1.113)$$

Бринкман выполнил эти вычисления для легких и тяжелых осколков ^{235}U , замедленных в уране. Результаты показаны на рис. 1.14. Заметим, что $N(T)$ уменьшается быстрее, чем T^{-1} , и, следовательно, большинство перемещений атомов вызваны атомами отдачи с низкой энергией. Поэтому всеми высокоэнергетическими атомами отдачи можно пренебречь. Другой способ рассмотрения заключается в том, что простой потенциал Кулона действителен только в диапазоне энергии, который не вызывает значительных смещений.

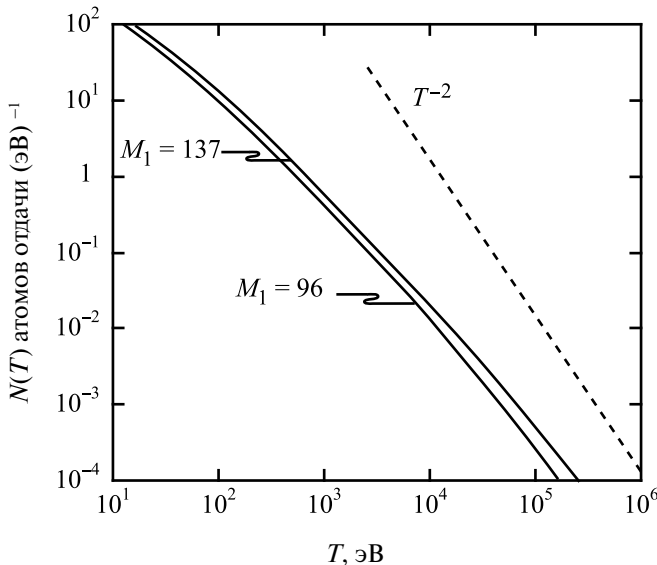


Рис. 1.14. Диапазон энергий атомов отдачи $N(T)dT$, вызванных осколками деления, замедляющимися в уране. Показаны два случая: $M_1 = 96$, $E_1 = 95$ МэВ и $M_1 = 137$, $E_1 = 55$ МэВ (из [13])

Тяжелые медленные ионы

Эти ионы представлены кривой «3» на рис. 1.12. Это очень важный класс столкновений, поскольку он покрывает большую область использования имплантационных процессов кВ-ионами в низкоэнергетических МВ-ускорителях при материаловедческих исследованиях радиационных повреждений тяжелыми ионами и моделировании радиационных воздействий. Численные оценки показывают, что с такими столкновениями приходится иметь дело в диапазоне $a < \rho < 10a$. Формализм, использованный для осколков деления в предыдущем разделе, относится к косым соударениям, а для лобовых столкновений необходим другой подход. Соответствующий потенциал для диапазона $a/5 \leq \rho \leq 5a$ определяется обратным квадратным приближением с использованием потенциала следующего вида:

$$V(r) = \frac{2E_R}{e} (Z_1 Z_2)^{5/6} \left(\frac{a_0}{r} \right)^2.$$

Подставив функцию потенциала в орбитальное уравнение (1.76), получим

$$\frac{\phi}{\pi} = 1 - \left(1 + \frac{a^2 E_a}{b^2 E_i} \right)^{-1/2}. \quad (1.114)$$

Используя уравнение (1.13) для выражения ϕ в терминах T , получим

$$T = \gamma E_i \cos^2 \left[\frac{\pi}{2} \left(1 + \frac{a^2 E_a}{b^2 E_i} \right)^{-1/2} \right]. \quad (1.115)$$

Выразив b в терминах T и дифференцируя, имеем

$$\sigma_s(E_i, T) = \frac{4E_a a^2 \alpha}{\gamma E_i^2 (1 - 4\alpha^2)^2 [x(1-x)]^{1/2}}, \quad (1.116)$$

где $x = T/\gamma E_i$ и $\pi\alpha = \cos^{-1} x^{1/2}$.

Для малых x (передача низкой энергии) мы имеем

$$\sigma_s(E_i, T) = \frac{\pi^2 a^2 E_a \gamma_{1/2}}{8 E_i^{1/2} T^{3/2}}. \quad (1.117)$$

Отметим, что энергия поперечного сечения переноса зависит от T . Средняя энергия отдачи равна

$$\bar{T} = \frac{\int_{\bar{T}}^{\gamma E_i} T \sigma_s(E_i, T) dT}{\int_{\bar{T}}^{\gamma E_i} \sigma_s(E_i, T) dT} = (\gamma E_i \bar{T})^{1/2}. \quad (1.118)$$

Полное поперечное сечение смещения принимает вид

$$\sigma_s(E_i) = \int_{\bar{T}}^{\gamma E_i} \sigma_s(E_i, T) dT = \frac{\pi^2 a^2 E_a \gamma^{1/2}}{4(E_i \bar{T})^{1/2}}. \quad (1.119)$$

Релятивистские электроны

Радиационное повреждение от электронов не очень опасно для материалов активной зоны реактора, но гораздо более интересно лабораторным исследователям, занимающимся изучением радиационных повреждений с использованием электронных микроскопов. Вследствие малой массы электрона, чтобы вызвать смещения атомов в решетке, энергии должны быть очень высоки. Так что для описания столкновений должна использоваться релятивистская квантовая механика. Даже в этом случае переданной высокой энергии достаточно только для появления ПВА без вторичных смещенных атомов.

В релятивистской форме импульс электрона с массой покоя m_0 и кинетической энергией E_i имеет вид

$$p_e^2 = \frac{E_i}{c^2} (E_i + 2m_0 c^2). \quad (1.120)$$

Так как смещаемый атом отдачи отскакивает нерелятивистским образом, то в выражении отдачи используется уравнение (1.9)

$$V_\ell'^2 = V_{CM}^2 + V_e'^2 - 2V_{CM} V_e' \cos \phi = 2V_{CM}^2 (1 - \cos \phi) = 4V_{CM}^2 \sin^2 \frac{\phi}{2}.$$

Закон сохранения импульса дает

$$p_e = (m_0 + M) V_{CM} \cong M V_{CM}.$$

Заменяя скоростные члены на энергетические в выражении $V_\ell'^2$, получим

$$T = \frac{2E_i}{Mc^2} (E_i + 2m_0 c^2) \sin^2 \frac{\phi}{2}, \quad (1.121)$$

$$\hat{T} = \frac{2E_i}{Mc^2}(E_i + 2m_0c^2). \quad (1.122)$$

Приближенное выражение уравнения Дирака для легких ионов [13] приводит к дифференциальному поперечному сечению рассеяния

$$\begin{aligned} \sigma_s(E_i, \phi) &= \frac{4\pi a_0^2 Z_2^2 E_R^2}{m_0^2 c^4} \frac{1-\beta^2}{\beta^4} \times \\ &\times \left[1 - \beta^2 \sin^2(\phi/2) + \pi \alpha \beta \sin(\phi/2)(1 - \sin(\phi/2)) \right] \times \cos(\phi/2) \operatorname{csc}^3(\phi/2), \end{aligned} \quad (1.123)$$

где $\beta = v/c$ и $\alpha = Z_2/137$. Это выражение приближается к закону рассеяния Резерфорда для малых β . С использованием уравнений (1.121) и (1.122) дифференциальное поперечное сечение рассеяния может быть записано в терминах T и \hat{T} :

$$\sigma_s(E_i, T) = \frac{4\pi a_0^2 Z_2^2 E_R^2}{m_0^2 c^4} \frac{1-\beta^2}{\beta^4} \left[1 - \beta^2 \frac{T}{\hat{T}} + \pi \frac{\alpha}{\beta} \left\{ \left(\frac{T}{\hat{T}} \right)^{1/2} - \frac{T}{\hat{T}} \right\} \right] \frac{\hat{T}}{T^2}. \quad (1.124)$$

Полное поперечное сечение найдено интегрированием уравнения (1.124) от \check{T} и \hat{T} :

$$\sigma_s(E_i) = \frac{4\pi a_0^2 Z_2^2 E_R^2}{m_0^2 c^4} \frac{1-\beta^2}{\beta^4} \left(\frac{\hat{T}}{\check{T}} - 1 \right) - \beta^2 \log \frac{\hat{T}}{\check{T}} + \alpha \beta 2 \left(\frac{\hat{T}}{\check{T}} \right)^{1/2} - 1 - \log \frac{\hat{T}}{\check{T}}. \quad (1.125)$$

Для электронов с энергиями выше порога повреждения и \hat{T}/\check{T} немного больше единицы имеем

$$\sigma_s(E_i) \cong \frac{4\pi a_0^2 Z_2^2 E_R^2}{m_0^2 c^4} \left(\frac{1-\beta^2}{\beta^4} \right)^2 \left[\frac{\hat{T}}{\check{T}} - 1 \right]. \quad (1.126)$$

На рис. 1.15 показано, что при достаточно высокой энергии $\sigma(E_i)$ приближается к асимптотической величине

$$\sigma_s(E_i) \rightarrow \frac{8\pi a_0^2 Z_2^2 E_R^2}{\check{T} M_2 c^2} \quad \text{при} \quad E_i \gg m_0 c^2. \quad (1.127)$$

Следует подчеркнуть, однако, что эти поперечные сечения наиболее точны для легких элементов, но серьезно недооценивают $\sigma_s(E_i)$ для тяжелых элементов ($Z > 50$). Табл. 1.5 представляет сводку переносов энергии и энергий поперечного сечения для различных видов взаимодействий атомов, обсуждаемых в разделе 1.2.

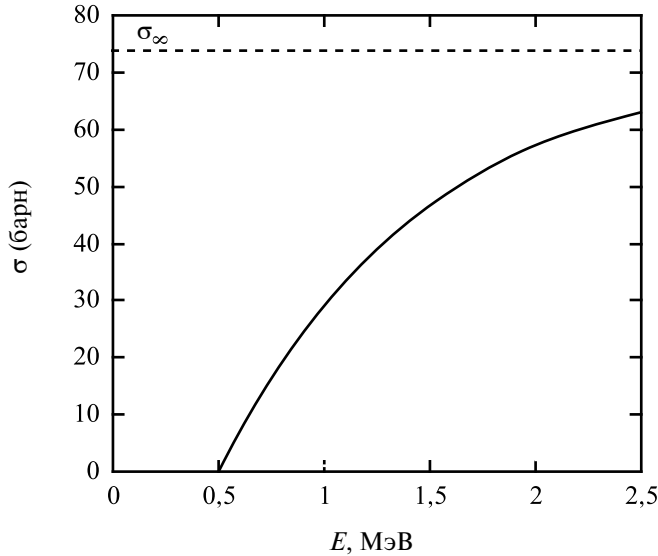


Рис. 1.15. Поперечное сечение повреждений меди, облучаемой электронами, $E_d = 25$ эВ ([13])

Таблица 1.5. Передача энергии и поперечное сечение передачи энергии для различных видов межатомного взаимодействия

Виды столкновений	Передача энергии Поперечное сечение передачи энергии	Номер уравнения
Столкновение твердых сфер (потенциал Борна — Майера) $\rho \sim r_c$	$\sigma_s(E_i, T) = \frac{\pi B^2}{\gamma E_i} \left[\ln \frac{A}{\eta E_i} \right]^2$	(1.87)
	$\bar{T} = \gamma E_i / 2$	(1.13)
Рассеяние Резерфорда (простой потенциал Кулона) $\rho \ll a$	$\sigma_s(E_i, T) = \frac{\pi b_0^2}{4} \frac{E_i \gamma}{T^2}$	(1.102)
	$\bar{T} \approx E_d \ln \left(\frac{\gamma E_i}{E_d} \right)$	(1.104)
Тяжелые ионы (обратно квадратичная зависимость) $a/5 \leq \rho \leq 5a$	$\sigma_s(E_i, T) = \frac{\pi^2 a^2 E_a \gamma^{1/2}}{8 E_i^{1/2} T^{3/2}}$	(1.117)
	$\bar{T} = (\gamma E_i \bar{T})^{1/2}$	(1.118)
Релятивистские электроны	$\sigma(E_i, T) = \frac{4\pi a_0^2 Z_2^2 E_R^2}{m_0^2 c^4} \frac{1 - \beta^2}{\beta^4} \times$ $\times \left[1 - \beta^2 \frac{T}{\hat{T}} + \pi \frac{\alpha}{\beta} \left\{ \left(\frac{T}{\hat{T}} \right)^{1/2} - \frac{T}{\hat{T}} \right\} \right] \frac{\hat{T}}{T^2}$	(1.124)

1.3. Ионизация при столкновениях

До этого момента столкновения рассматривались как дискретные процессы. Однако помимо столкновения с ядрами или между ядрами, ионами или атомами, проходящими через решетку, энергия может теряться электронным возбуждением, ионизацией или тормозным излучением (потерей энергии электронов, проходящих через поле ядер Кулона с эмиссией рентгеновских лучей). Эти явления могут быть рассмотрены как более или менее непрерывные процессы. То, что далее излагается, является лишь интерпретацией явлений потери энергии в твердых телах.

1.3.1. Теория потери энергии

Мы заинтересованы в нахождении дифференциальных потерь энергии иона или атома, проходящего через решетку. Начнем с определения потерь энергии на единицу длины как $-dE/dx$ (или $NS(E)$, где N — плотность числа атомов, S — энергия на единицу площади, необходимая для остановки частицы), так, чтобы полная потеря энергии могла тогда быть приближенно оценена суммой компонентов

$$\left(-\frac{dE}{dx}\right)_{\text{total}} = \left(-\frac{dE}{dx}\right)_n + \left(-\frac{dE}{dx}\right)_e + \left(-\frac{dE}{dx}\right)_r, \quad (1.128)$$

где подстрочные индексы определены следующим образом: n — упругая, e — электронная, r — радиационная потери энергии.

Для большинства применений, в которых мы заинтересованы, потеря энергии излучением будет наименьшей и ею можно пренебречь.

Из нашего обсуждения раздела 1.2.1 следует, что для точного описания замедления иона или атома по всему диапазону энергий от \hat{T} до \check{T} , где \hat{T} может быть на уровне МэВ, а \check{T} достигать значений ~ 10 эВ, потребуется сложить вместе несколько «частей» функций потенциалов (см. рис. 1.9). Это может вызвать проблемы сшивки разрывов. Кроме того, пределы этих функций часто отличаются по своим зависимостям от M и Z .

Однако мы можем отделить или подразделить части затрачиваемых энергий по типу взаимодействия и, следовательно, по режимам потерь энергий. В высокоэнергетическом режиме $\rho \ll a$ и $S_e \gg S_n$ эти взаимодействия рассматриваются как чистые столкновения по закону Кулона. В режиме низкой энергии $\rho \approx a$ и $S_n > S_e$. Это важная область затрат энергии на смещения. В любом случае мы можем выбрать формализм для вычисления затрачиваемой энергии $-dE/dx = NS(E)$.

Если мы знаем, что поперечное сечение передачи энергии $\sigma(E_i, T)$ либо для S_n , либо для S_e , то мы можем вычислить среднее значение переданной энергии $\bar{T} = \frac{\int T \sigma dT}{\int \sigma dT}$ = потерянная или переданная энергия и средний

пройденный путь между столкновениями $\lambda = 1/N\sigma$.

Тогда отношение этих двух значений означает потерю энергии на единицу длины, где N — значение плотности атомов мишени:

$$\frac{dE}{dx} = \frac{\bar{T}}{\lambda} = \frac{\int_{\bar{T}}^{\hat{T}} T \sigma(E_i, T) dT}{\int_{\bar{T}}^{\hat{T}} \sigma(E_i, T) dT} \cdot N \int_{\bar{T}}^{\hat{T}} \sigma(E_i, T) dT = N \int_{\bar{T}}^{\hat{T}} T \sigma(E_i, T) dT. \quad (1.129)$$

Другой способ решения следующий. Рассмотрим взаимодействие падающей частицы с аморфной мишенью, содержащей среднее число атомов N на единицу объема (рис. 1.16). При пересечении материала между слоями x и $x + \Delta x$ частица пройдет расстояние в пределах b_1 для всех частиц мишени $N\Delta x 2\pi b_1 db_1$ и передаст каждой энергию $T(E_i, b)$. Полная переданная энергия всем частицам мишени в слое получится при интегрировании по всем возможным параметрам взаимодействия:

$$\Delta E = N \Delta x \int_0^{\infty} T 2\pi b db.$$

Принимая $\Delta E \ll E$ и поделив на Δx в пределе $x \rightarrow 0$, получим

$$\left. \frac{\Delta E}{\Delta x} \right|_{\lim_{x \rightarrow 0}} = \frac{dE}{dx} = N \int_0^{\infty} T 2\pi b db.$$

Зная, что $\sigma(E_i, T) dT = 2\pi b db$, имеем

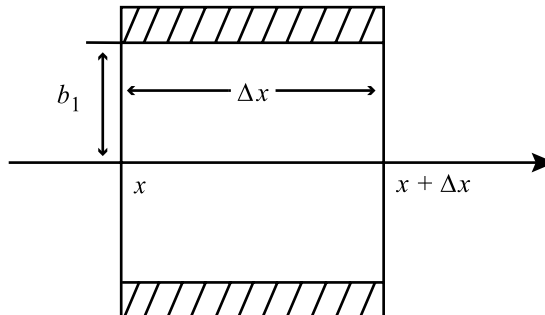


Рис. 1.16. Схема налетающей частицы с энергией E , проходящей расстояние b_1 в пределах кольцевого образца, содержащего $N\Delta x 2\pi b_1 db$ атомов

$$\frac{dE}{dx} = N \int_T^{\hat{T}} T \sigma(E_i, T) dT,$$

что дает тот же результат, что и уравнение (1.129).

Рассмотрим теперь остановку ядер или потерю энергии от упругих соударений.

Энергия остановки ядер

Мы определяем $(-dE/dx)_n$ или $NS_n(E_i)$ как энергию, потерянную на ядрах мишени, когда частица с энергией E_i пересекает длину мишени dx единичной плотности. Простое определение значения $(-dE/dx)_n$ может быть сделано, если предположить, что каждое ядро мишени действует независимо от других ядер в замедлении частицы. В основном мы пренебрегаем любыми возможными взаимодействиями между ядрами. Это есть справедливое приближение для аморфных мишеней и хорошее первое приближение также для кристаллических материалов.

Случай 1: высокоэнергетические упругие соударения, $\rho \ll a$.

Рассеяние Резерфорда описывает этот тип взаимодействия точно. Вспомним, что для простого рассеяния Кулона поперечное сечение передачи энергии (уравнение (1.102)) имеет вид

$$\sigma_s(E_i, T) = \frac{\pi b_0^2}{4} \frac{\gamma E_i}{T^2}.$$

Поэтому энергия для остановки определяется так:

$$\left. \frac{dE}{dx} \right|_n = NS_n(E_i) = N \int_T^{\gamma E_i} T \frac{\pi b_0^2}{4} \frac{\gamma E_i}{T^2} dT = \frac{N \pi b_0^2}{4} \gamma E_i \ln \left(\frac{\gamma E_i}{\tilde{T}} \right), \quad (1.130)$$

где $\hat{T} = \gamma E_i$ и \tilde{T} — значение T , которое дает $b = a$ или $\tilde{T}_b = \frac{\epsilon^2 \gamma E_a^2}{4 E_i}$.

Заменив b_0 уравнением (1.93), получим

$$\left. \frac{dE}{dx} \right|_n = NS_n(E_i) = \frac{N \pi Z_1^2 Z_2^2 \epsilon^4}{E_i} \frac{M_1}{M_2} \ln \left(\frac{\gamma E_i}{\tilde{T}_b} \right). \quad (1.131)$$

Отметим, что для подобных атомов $\gamma = 1$ и $M_1 = M_2$, таким образом, имеем

$$NS_n(E_i) = \frac{N \pi Z_1^2 Z_2^2 \epsilon^4}{E_i} \ln \left(\frac{E_i}{\tilde{T}_b} \right). \quad (1.132)$$

Заменив E_a уравнением (1.107) в выражении для \tilde{T}_b , получим

$$\tilde{T}_b = \frac{4E_R^2 (Z_1 Z_2)^2 (Z_1 Z_2)^{2/6}}{E_i}. \quad (1.133)$$

Используя $a = a_0 / (Z_1 Z_2)^{1/6}$ вместо $(Z_1 Z_2)^{1/6}$, находим

$$\tilde{T}_b = \frac{4E_R^2 a_0^2 Z^4}{a^2 E_i}$$

для $z_1 = z_2$, и тогда уравнение (1.132) принимает вид

$$\begin{aligned} NS_n(E_i) &= \frac{4N\pi Z^4 a_0^2 E_R^2}{E_i} \ln\left(\frac{E_i}{\tilde{T}_b}\right) \\ &= \frac{4N\pi Z^4 a_0^2 E_R^2}{E_i} \ln\left(\frac{a^2 E_i^2}{4a_0^2 E_R^2 Z^4}\right). \end{aligned} \quad (1.134)$$

Случай 2: упругие соударения с низкой энергией, $\rho \sim a$.

При промежуточных и более низких энергиях простое выражение рассеяния Кулона не может правильно описать взаимодействия. Здесь необходимо использовать экранированную функцию Кулона, чтобы учесть влияние электронов в межъядерном пространстве. Линдхард Нильсен и Шарф [14] предложили универсальное однопараметровое выражение поперечного сечения рассеяния с одним параметром в сокращенной записи:

$$\sigma = \frac{-\pi a^2}{2} \frac{f(t^{1/2})}{t^{1/3}}, \quad (1.135)$$

где t — безразмерный параметр столкновения, определяемый

$$t = \epsilon^2 \frac{T}{\tilde{T}}, \quad (1.136)$$

и ϵ — безразмерная энергия, определяемая как

$$\epsilon = \frac{aM_2}{Z_1 Z_2 \epsilon^2 (M_1 + M_2)} E_i. \quad (1.137)$$

Линдхард и др. [14] представили $f(t^{1/2})$ в виде простой функции масштаба, где t являлась мерой глубины проникновения в атом во время столкновения и при большом t становилась хорошим приближением. Функция $f(t^{1/2})$ представлена сплошной линией на рис. 1.17. Аналитиче-

ское выражение функции, разработанное Винтербоном и др. [15], имеет вид

$$f(t^{1/2}) = \lambda' t^{1/6} [1 + (2\lambda' t^{2/3})^{2/3}]^{-3/2}, \quad (1.138)$$

где $\lambda' = 1,309$. Обобщенное уравнение (1.138) для закона рассеяния энергии представляет

$$(t^{1/2}) = \lambda_m t^{\frac{1}{2}-m}, \quad (1.139)$$

где $\lambda_{1/3} = 1,309$, $\lambda_{1/2} = 0,327$ и $\lambda_1 = 0,5$. Уравнение (1.139) приблизительно описывает рассеяние по потенциалу в виде $V(r)\alpha r^{-s} = r^{-1/m}$, где s — экспонента энергетического закона.

При низких энергиях (низкие ϵ), изменяющихся по закону $V(r)\alpha r^{-3}$, $m = 1/3$, и малых временах столкновения t проникновение невелико и приводит к зависимости $t^{1/6}$. При более высоких энергиях экранирующие эффекты минимальны, потенциал описывается зависимостью $V(r)\alpha r^{-1}$, $m = 1$ и временем $t^{-1/2}$. При промежуточных энергиях функция (поперечное сечение) медленно изменяется и проще всего описывается потенциалом вида $V(r)\alpha r^{-2}$ с $m = 1/2$, не имеющим никакой зависимости

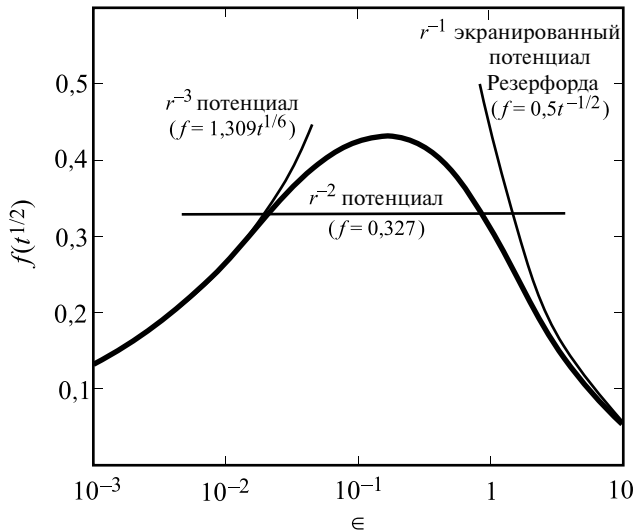


Рис. 1.17. Сокращенное выражение дифференциального поперечного сечения, вычисленного для потенциала Ферми — Томаса, представлено сплошной линией в диапазоне $10^{-3} < \epsilon < 10$ уравнением (1.135). Тонкие линии в левом и правом частях рисунка и горизонтальная линия в центре вычислены с использованием закона поперечного сечения энергии (1.139) (из [15])

от t , что означает, что поперечное сечение независимо от ϵ . Для экранированного потенциала Кулона дифференциальное поперечное сечение передачи энергии, определяемое в сокращенной записи уравнением (1.135), используется для определения энергии остановки ядер в виде

$$\left(\frac{dE}{dx}\right)_n = \frac{-N\pi a^2 \hat{T}}{\epsilon^2} \int_0^{\hat{T}} f(t^{1/2}) dt^{1/2}. \quad (1.140)$$

Это выражение может быть записано в универсальной форме [16]:

$$\rho_R = \frac{N4\pi a^2 M_1 M_2}{(M_1 + M_2)^2} R, \quad (1.141)$$

где R — мера длины в лабораторной системе. Настаси и др. [17] установили соотношения между $S_n(E)$ и $S_n(\epsilon)$:

$$S_n(\epsilon) = \frac{M_1 + M_2}{M_1} \frac{1}{4\pi a Z_1 Z_2 \epsilon^2} S_n(E) = \frac{\epsilon}{\pi a^2 \gamma E_i} S_n(E), \quad (1.142)$$

которое, будучи объединено с уравнением (1.140), приводит к следующему выражению:

$$\left(\frac{d\epsilon}{d\rho}\right) \equiv S_n(\epsilon) = \frac{1}{\epsilon} \int_0^\epsilon f(t^{1/2}) dt^{1/2}, \quad (1.143)$$

которое должно быть решено в численном виде. Результат представлен на рис. 1.18 в виде сокращенной функции остановки ядер. Уравнение (1.143) может быть решено точно для приближенной зависимости функции $f(t^{1/2})$ (уравнение (1.139)):

$$S_n(\epsilon) = \frac{\lambda_m}{2(1-m)} \epsilon^{1-2m}, \quad (1.144)$$

где λ_m дано уравнением (1.139). Заменяя экранированную длину a универсальной экранированной длиной a_U , $S_n(\epsilon)$ в уравнении (1.142) может быть представлена в виде

$$S_n(\epsilon) = \frac{\epsilon}{\pi a_U^2 \gamma E_i} \int_0^{\hat{T}} T \sigma(E_i, T) dT, \quad (1.145)$$

и, используя тождество

$$\int_0^{\hat{T}} \sigma(E_i, T) dT = \int_0^{b_{\max}} 2\pi b db, \quad (1.146)$$

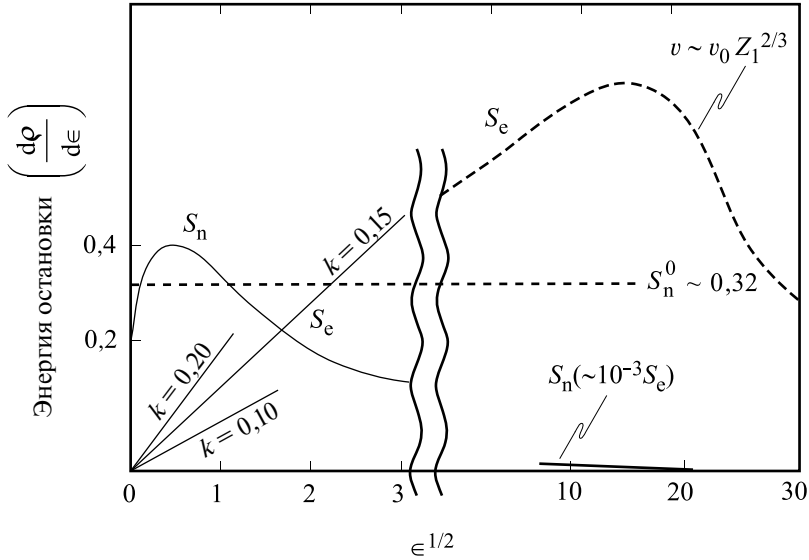


Рис. 1.18. Сокращенные выражения поперечных сечений ядерных и электронных остановки в зависимости от $\epsilon^{1/2}$

получим выражение для поперечного сечения остановки ядер в сокращенной форме:

$$S_n(\epsilon) = \frac{\epsilon}{a_U^2} \int_0^\infty \sin^2 \frac{\phi}{2} db^2. \quad (1.147)$$

Зиглерт [18] использовал универсальную экранированную функцию (рис. 1.19)

$$\chi_U = 0,1818e^{-3,2x} + 0,5099e^{-0,9423x} + 0,2802e^{-0,4029x} + 0,02817e^{-0,2016x} \quad (1.148)$$

и численное интегрирование уравнений (1.76) и (1.147) для вычисления универсального сокращенного поперечного сечения остановки ядер, показанного на рис. 1.20. Выражение

$$S_n(\epsilon) = \frac{0,5 \ln(1 + 1,1383 \epsilon)}{(\epsilon + 0,01321 \epsilon^{0,21226} + 0,19593 \epsilon^{0,5})} \quad (1.149)$$

пригодно для прикладных вычислений универсального значения остановки ядер для иона с энергией E_i в лабораторной системе координат

$$S_n(E_i) = \frac{8,462 \cdot 10^{-15} Z_1 Z_2 M_1 S_n(\epsilon) \text{ эВ см}^2}{(M_1 + M_2)(Z_1^{0,23} + Z_2^{0,23}) \text{ atom}}, \quad (1.150)$$

где значение ZBL обозначает сниженную энергию

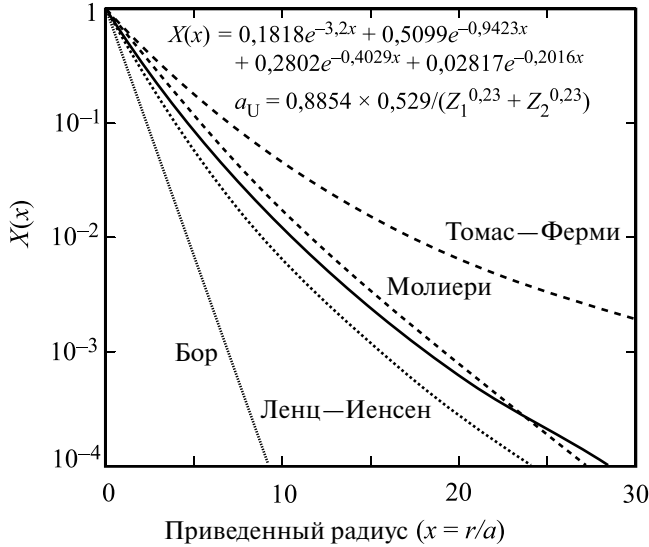


Рис. 1.19. Универсальная экранированная функция χ_U (сплошная линия) из уравнения (1.148) в зависимости от $x = r/a_U$, где a_U — универсальная длина экранирования, характеризуемая величиной $a_U = 0,8854 a_0 (Z_1^{0,23} + Z_2^{0,23})$ наряду с несколькими другими функциями экранирования (из [17])

$$\epsilon = \frac{32,53 M_2 E_i}{Z_1 Z_2 (M_1 + M_2) (Z_1^{0,23} + Z_2^{0,23})}. \quad (1.151)$$

Два приближения к $S_n(E_i)$ рассмотрены для столкновений в промежуточном режиме энергий. Первое использует обратный квадратный потенциал уравнения (1.59). Возможны точные оценки орбит [16], и уравнение (1.76) дает

$$\frac{\phi}{\pi} = 1 - \frac{1}{\left(1 + \frac{a^2 E_a}{b^2 E_i}\right)^{1/2}}. \quad (1.152)$$

Используя уравнение (1.13) для определения T , получим

$$T = \gamma E_i \cos^2 \left[\frac{\pi}{2} \left(1 + \frac{a^2 E_a}{b^2 E_i}\right)^{1/2} \right]. \quad (1.153)$$

Выражая b^2 в терминах T после дифференцирования и использования связи между $\sigma(E_i, T)$ и b из уравнения (1.78), получим

$$\sigma_s(E_i, T) = \frac{4 E_a^2 \alpha}{\gamma E_i^2 (1 - 4\alpha^2)^2 (x(1-x))^{1/2}}, \quad (1.154)$$

где $x = T/E_i$, $\pi\alpha = \cos^{-1}\sqrt{x}$, и для малых $x(T/E_i)$ уравнение (1.154) принимает вид

$$\sigma_s(E_i, T) = \frac{\pi^2 a^2 E_a \gamma^{1/2}}{8 E_i^{1/2} T^{3/2}}. \quad (1.155)$$

Полное поперечное сечение и среднее значение энергии отдачи вычислены по уравнению (1.155), принимая снижение до нуля при $\bar{T} = \gamma E_i$:

$$\bar{T} = (\gamma E_i \bar{T})^{1/2}, \quad (1.156)$$

$$\sigma_s(E_i) = \frac{\pi^2 a^2 E_a \gamma^{1/2}}{4 (E_i \bar{T})^{1/2}}. \quad (1.157)$$

Тогда энергия остановки равна

$$S_n(E_i) = \int_{\bar{T}}^{\hat{T}} T \sigma(E_i, T) dT$$

и, заменив поперечное сечение передачи энергии из уравнения (1.155), получим

$$\left(\frac{dE}{dx} \right)_n = N S_n(E_i) = \frac{\pi^2}{4} a^2 N E_a \gamma. \quad (1.158)$$

Такой же результат получим, приняв во внимание факт, что

$$\frac{dE}{dx} = \frac{\bar{T}}{\lambda} = N \sigma_s \bar{T}, \quad (1.159)$$

где $\lambda = 1/N\sigma_s$ является средним значением свободного пути между столкновениями после замены σ_s и T из (1.156) и (1.157).

Второе приближение $S_n(E_i)$ использует экранированную функцию Ферми — Томаса. Предположим, что процессы рассеяния с малыми углами ответственны за большую часть потерь энергии при столкновении частиц с мишенью. Когда это действительно так, то переданная энергия T может быть выражена в виде функции E_i и b . Решив уравнение (1.76) для ϕ с использованием экранированной функции Ферми — Томаса из уравнения (1.49) и распространяя решение на малые углы ϕ , получаем

$$\phi = \pi - 2 \int_0^{\hat{x}} \left[\frac{1}{b^2} \left(1 - \frac{V(x)}{\eta E_i} - b^2 x^2 \right) \right]^{-1/2} dx. \quad (1.160)$$

Учитывая, что

$$V(r) = \frac{Z_1 Z_2 \epsilon^2}{r} f(r/a), \text{ где } f(r/a) = a/r,$$

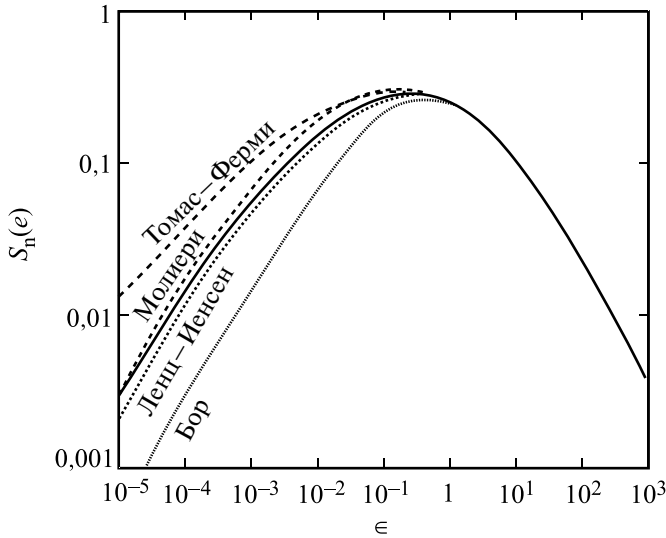


Рис. 1.20. Энергия остановки ядер в сокращенных единицах уравнения (1.149)

имеем

$$\phi = \pi - b \left[b^2 + \frac{Z_1 Z_2 \epsilon^2 a}{E_R} \right]^{-1/2}. \quad (1.161)$$

Определив b , подставив в выражение

$$\sigma(E_i, T) d\Omega = 2\pi b db$$

и используя уравнение (1.13) для $\sigma_s(E_i, T) dT$, мы можем найти $S_n(E_i)$ из уравнения (1.129):

$$S_n^0 = K \frac{Z_1 Z_2}{Z^{1/3}} \frac{M_1}{M_1 + M_2} \text{эВ см}^2, \quad (1.162)$$

где величина $Z^{1/3} = (Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})$ и $K = 1,1587\pi\epsilon^2 a_0 = 2,8 \cdot 10^{-15} \text{эВ см}^2$, называемая эталоном энергии остановки, показана на рис. 1.18. Отметим, что S_n^0 в первом приближении не зависит от энергии частицы. Оценки по S_n^0 будут достаточно близки для преобладания малоуглового рассеяния.

Напомним, что главное предположение при получении уравнения (1.162) было связано с условием, что потеря энергии частиц может быть представлена рядом малых углов рассеяния ϕ . В табл. 1.6 представлены углы рассеяния и потери энергии для 50 кэВ частиц кремния, падающих на кремниевую мишень. Отметим, что для $\rho/a \geq 1$ это предположение четко выполняется. Рассмотрим теперь потери энергии электронов.

Таблица 1.6. Углы рассеяния и потери энергии для 50 кэВ частиц кремния на атомах кремниевой мишени

$\rho/a =$	10	1	0,1
ϕ (радианы)	0,004 π	0,26 π	0,89 π
θ (градусы)	0,36	23,4	80,5
T/E	$4 \cdot 10^{-5}$	0,16	0,973
T (кэВ)	0,002	8	49

Энергия остановки электронов

Теоретические расчеты энергии остановки электронов являются намного более сложной проблемой, чем вычисление S_n . Для описания столкновений между ионами и электронами мы можем использовать классическое уравнение (уравнение (1.106)). Но здесь мы должны принять во внимание двойное столкновение между тяжелым движущимся ионом и электроном. Этот подход уместен при участии всех электронов при условии, что скорость иона превышает скорость самого прочно связанного электрона. Мы можем определить T так:

$$\hat{T} \cong \gamma_e E_i, \quad (1.163)$$

где $\gamma_e = 4m_e M / (m_e + M)^2$ и, следовательно, \hat{T} очень мало. Определим также низший предел электрон-ионного взаимодействия эффективным средним уровнем возбуждения ионизации \bar{I} ¹. Отметим также, что необходимо использовать электронную плотность, которая в Z_2 раз равна плотности атома с коэффициентом Z_2

$$n = NZ_2. \quad (1.164)$$

Написав выражение для определения энергии остановки взаимодействия из-за начавшейся ионизации, эквивалентное уравнению (1.130), получим

$$\begin{aligned} \left(\frac{dE}{dx} \right)_e &= \frac{n}{Z_2} \int_{\bar{I}}^{\gamma_e E_i} T \sigma_s(E_i, T) dT = \frac{n}{Z_2} \frac{\pi b_0^2}{4} \gamma_e E_i \ln \left(\frac{\gamma_e E_i}{\bar{I}} \right) = \\ &= N \pi \frac{Z_1^2 Z_2^2 \epsilon^4}{E_i} \frac{M}{m_e} \ln \left(\frac{\gamma_e E_i}{\bar{I}} \right). \end{aligned} \quad (1.165)$$

Однако эта формула дает только приближенную оценку. Более точное выражение получено на основе квантомеханической трактовки аппроксимации Борна, которая физически означает, что возмущение за счет

¹ В первом приближении $\bar{I} = kZ_2$, где $k = 11,5$ эВ.

падающих частиц существенно не нарушает электронного движения при больших параметрах взаимодействия.

Из результатов анализа следует необходимость введения коэффициента 2 из-за малой передачи энергии, когда закон свободного рассеяния Кулона не выполняется. Формула Бете — Блоха дает хорошее приближение

$$\left(-\frac{dE}{dx}\right)_e = \frac{N2\pi Z_1^2 Z_2 \epsilon^4}{E_i} \frac{M}{m_e} \ln\left(\frac{\gamma_e E_i}{\bar{I}}\right) = \frac{2\pi N Z_1^2 M \epsilon^4}{m_e E_i} B, \quad (1.166)$$

где $B = Z_2 \ln(\gamma_e E_i / \bar{I})$ выражает число остановок. Для релятивистских скоростей имеем

$$B = Z_2 \left\{ \ln\left(\frac{\gamma_e E_i}{\bar{I}}\right) - \ln(1 - \beta^2) - \beta^2 \right\}, \quad (1.167)$$

где $\beta = v/c$ и c является скоростью света. Отметим, что при высоких энергиях S_n и S_e изменяются почти как $1/E_i$:

$$\frac{S_e}{S_n} = \frac{2M_2}{m_e Z_2} \frac{\ln\left(\frac{\gamma_e E_i}{\bar{I}}\right)}{\ln\left(\frac{\gamma_e E_i}{E_d}\right)}. \quad (1.168)$$

Применив уравнение (1.168) для случая МэВ протонов, получим величину ~ 2000 для $\bar{I} \sim 11,5Z_2$ эВ, или энергию остановки электронов, в 2000 раз меньшую энергии остановки ядер.

При низких скоростях электроны внутренних оболочек оказывают меньшее влияние на величину энергии остановки. Кроме того, вероятность прекращения взаимодействия (нейтрализация) настолько велика, что столкновения между частицами и окружающими электронами становятся почти упругими. Потеря энергии пропорциональна скорости частиц. Линдхард, Шарф, Шиотт (ЛШШ) и Фирсов дали теоретические описания этой области энергий. Полученное ими выражение основано на упругом рассеянии свободных электронов мишени в статичной области экранированного точечного заряда. Выражение Фирсова основано на простой геометрической модели обмена импульсами между частицей и атомом мишени во время глубокого проникновения в электронные облака. Линдхард и Винсер [19] показали, что, пока скорость иона меньше скорости электрона, имеющего энергию, равную энергии Ферми E_f свободного электронного газа, S_e будет пропорциональна скорости иона или половине его энергии. При использовании потенциала формы

$$V(r) = \frac{2(Z_1 Z_2)^{1/2} \epsilon^2}{r} \chi_{TF} \left[1, 13(Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{1/2} \frac{r}{a_0} \right] \quad (1.169)$$

энергия остановки Линдхарда — Шарфа принимает вид

$$\left(\frac{dE}{dx} \right)_e = k' E^{1/2}, \quad (1.170)$$

$$k' = 3,83 \frac{Z_1^{7/6} Z_2}{M_1^{1/2} (Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{3/2}}, \quad (1.171)$$

где $S_e(E)$ дана в единицах 10^{-15} эВсм²/атом и E — в кэВ. Выражение поперечного сечения остановки в сокращенной записи представлено так:

$$S_e(\epsilon) = \left(\frac{d\epsilon}{d\rho} \right)_e = k \epsilon^{1/2},$$

где

$$k = \frac{0,07937 Z_1^{2/3} Z_2^{1/2} \left(1 + \frac{M_2}{M_1} \right)^{3/2}}{(Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{3/4} M_2^{1/2}}. \quad (1.172)$$

Универсальное поперечное сечение остановки ядер показано на рис. 1.18, где единственная кривая представляет все возможные столкновения частиц с атомами и поперечное сечение остановки электронов (1.172) сводит результаты к семейству линий для каждой возможной комбинации столкновения частиц и атомов мишени.

Приближенная трактовка, приводящая к аналитическому выражению, получена следующим образом. Предположим, что масса атома M_1 , перемещающегося со скоростью v_1 , производит лобовое столкновение с электроном, движущимся в противоположном направлении со скоростью v_e . Относительная начальная скорость этих двух частиц равна

$$v_{r0} = v_1 + v_e. \quad (1.173)$$

После столкновения направление вектора скорости изменяется без изменения величины:

$$v_{rf} = -(v_1 + v_e). \quad (1.174)$$

Скорость атома после столкновения с электроном равна

$$v_{1f} = v_{CM} + \left(\frac{m_e}{m_e + M_1} \right) v_{rf} = \frac{M_1 v_1 - m_e v_e}{M_1 + m_e} - \left(\frac{m_e}{M_1 + m_e} \right) (v_1 + v_e) \equiv v_1 - \frac{2m_e v_e}{M_1}, \quad (1.175)$$

где значением m_e пренебрегают по сравнению с M_1 . Изменение энергии атома из-за столкновения имеет вид

$$\Delta E = \Delta \left(\frac{1}{2} M_1 v_1^2 \right) \cong M_1 v_1 (v_1 - v_{1f}) = 2m_e v_e v_1. \quad (1.176)$$

Скорость электрона после столкновения равна

$$\begin{aligned} v_{ef} &= V_{CM} - \left(\frac{M_1}{M_1 + m_e} \right) v_{1f} \\ &= \frac{M_1 v_1 - m_e v_e}{M_1 + m_e} + \left(\frac{M_1}{M_1 + m_e} \right) (v_1 + v_e) = 2v_1 + v_e, \end{aligned} \quad (1.177)$$

увеличение скорости электрона дает

$$\Delta v_e = v_{ef} - v_e = 2v_1. \quad (1.178)$$

Число электронов проводимости в металле приблизительно равно плотности атомов N . Но только те электроны со скоростями, лежащими в диапазоне Δv_e скорости Ферми v_f , в состоянии участвовать в замедлении процесса. Поэтому эффективная плотность электронов в металле равна

$$n_e \cong N \left(\frac{\Delta v_e / 2}{v_f} \right) = \left(\frac{v_1}{v_f} \right) N. \quad (1.179)$$

Поток эффективных электронов, достигающих атома, равен

$$I_e = n_e v_{10} = n_e (v_1 + v_e) \cong n_e v_e, \quad (1.180)$$

и скорость столкновения эффективных электронов с единичным атомом — $\sigma_e I_e$, где σ_e — поперечное сечение взаимодействия движущегося атома с электронами проводимости. Тогда энергия остановки представляется скоростью потери энергии движущегося атома с эффективным электроном, разделенным на скорость атома:

$$\left(-\frac{dE}{dx} \right)_e = \frac{-\sigma_e I_e \Delta E}{v_1}. \quad (1.181)$$

Подставив уравнения (1.176), (1.179) и (1.180) в вышеупомянутое выражение и записав v_e и v_1 соответственно в виде $(2E_f/M_e)^{1/2}$ и $(2E/M_1)^{1/2}$, получим

$$\left(-\frac{dE}{dx} \right)_e = -8\sigma_e N \left(\frac{m_e}{M_1} \right)^{1/2} E^{1/2} = -kE^{1/2}, \quad (1.182)$$

$$k = 8\sigma_e N \left(\frac{m_e}{M_1} \right)^{1/2}, \quad (1.183)$$

Таблица 1.7. Сводка выражений скоростей потери энергии для разных типов взаимодействий

Тип взаимодействия	Ядерные скорости потери энергии	Электронные скорости потери энергии
Высокая E Кулон	$\frac{4N\pi Z^4 a_0^2 E_0^2}{E_i} \ln\left(\frac{a^2 E_i^2}{4a_0^2 E_R^2 Z^4}\right) \quad (1.134)$	$N\pi \frac{Z_1^2 Z_2 \epsilon^4}{E_i} \frac{M}{m_e} \ln\left(\frac{\gamma_e E_i}{I}\right) \quad (1.165)$
Низкая E 1.	Общий вид выражения: $\frac{8,462 \cdot 10^{-15} Z_1 Z_2 M_1 S_n(\epsilon)}{(M_1 + M_2)(Z_1^{0,23} + Z_2^{0,23})} \quad (1.150)$	$\left(\frac{dE}{dx}\right)_e = k' E_i^{1/2} \quad (1.170)$
	Обратноквадратичный потенциал: $\frac{\pi^2}{4} a^2 N E_a \gamma \quad (1.158)$	$k' = 3,83 \frac{Z_1^{7/6} Z_2}{M_1^{1/2} (Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{3/2}}.$
2.	Экранирование Томаса—Ферми: $K \frac{Z_1 Z_2}{Z^{1/3}} \frac{M_1}{M_1 + M_2} \quad (1.162)$	$\left(\frac{dE}{dx}\right)_e = k E^{1/2} \quad (1.182)$
	$Z^{1/3} = (Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{1/2}$ $K = 1,158\pi e^2 a_0 = 2,8 \cdot 10^{-15} \text{ эВ см}^2$	$k = 8\sigma_e N \left(\frac{m_e}{M_1}\right)^{1/2}$ верно для $0 < E(\text{кэВ}) < 37Z^{7/3}$

где $k = 0,03NZ^{2/3} \text{ эВ}^{1/2}/\text{нм}$ для подобных атомов, или $S_e = k'E^{1/2}$, где $k' = 3 \cdot 10^{-15} Z^{2/3} \text{ эВ}^{1/2} \text{ см}^2$ для тех же атомов. Оба уравнения действительны для $0 < E(\text{кэВ}) < 37Z^{7/3}$. Например, для $M_2 = \text{Si}$ $k'_{\text{Si}} \sim 0,2 \cdot 10^{-15} \text{ эВ}^{1/2} \text{ см}^2$. Табл. 1.7 обобщает ядерные и электронные скорости потери энергии для различных типов взаимодействий, использованных в разделе 1.3.1.

1.3.2. Диапазон вычислений

Мы получили выражения для двух основных форм потери энергии: (1) столкновения иона с ядрами мишени и (2) взаимодействия иона с электронами в твердом теле. Теперь предположим, что эти две формы потери энергии независимы друг от друга.

Принятое допущение позволяет выразить общую потерю энергии единственной частицы в виде суммы индивидуальных вкладов

$$\left(\frac{dE}{dx}\right)_T = N[S_n(E) + S_e(E)]. \quad (1.184)$$

Это выражение может быть использовано для определения общего расстояния пробега R , необходимого для остановки частицы с начальной энергией E_i :

$$R = \int_0^R dx = \frac{1}{N} \int_0^{E_i} \frac{dE}{[S_n(E) + S_e(E)]}. \quad (1.185)$$

Это расстояние, называемое усредненной общей дистанцией, позволяет оценить среднюю глубину проникновения ионов в аморфных телах. Пример оценки полной длины пути с использованием обратно квадратного потенциала (см. уравнение (1.155)) дает

$$\frac{dE}{dx} = N \int_T^{\gamma E_i} T \sigma(E_i, T) dT \quad \text{где} \quad \sigma(E_i, T) = \frac{\pi^2 a^2 E_a \gamma^{1/2}}{8 E_i^{1/2} T^{3/2}} = \frac{\pi^2}{4} a^2 N E_a \gamma \quad (1.186)$$

и
$$\bar{x} = \bar{R}_{\text{total}} = \int_0^{E_i} \frac{dE'}{(dE/dx)_n} = \int_0^{E_i} \frac{dE'}{\frac{\pi^2}{4} a^2 N E_a \gamma} = \frac{4 E_i}{\pi^2 a^2 N E_a \gamma} \quad \text{где} \quad E_i \leq E_a. \quad (1.187)$$

Основной интерес заключается, однако, в определении проекции полного пробега на начальном участке пути частицы (рис. 1.21). Кроме того, необходимо знать отклонения от проецированной длины, поскольку не все частицы претерпевают одинаковую последовательность столкновений. Поэтому определяются следующие параметры:

\bar{R}_p — средняя проецированная длина пути,

ΔR_p — стандартное отклонение от проецированной дистанции пути.

Методы для вычисления \bar{R}_p были развиты Линдхардом и др. [16]. Для случаев, когда передача энергии T мала по сравнению с полной энергией частицы, дифференциальное уравнение для определения \bar{R}_p имеет вид

$$\bar{R}_p = \int_0^{E_i} \frac{dE'}{\beta_1(E')} \exp \left[\int_{E_i}^{E'} \frac{\alpha_1(x) dx}{\beta_1(x)} \right], \quad (1.188)$$

где
$$\alpha_1(E) = \frac{\mu}{2} N \frac{S_n(E)}{E},$$

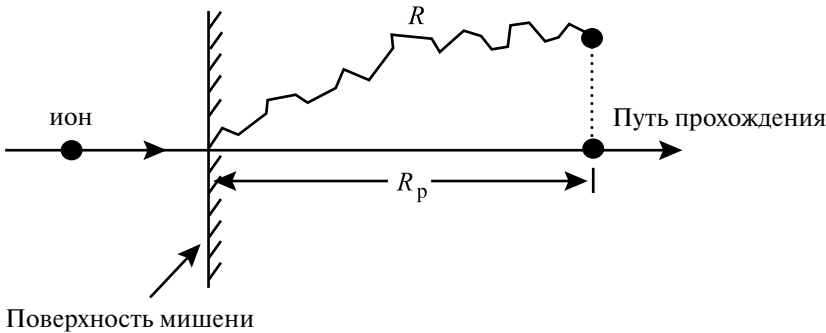


Рис. 1.21. Полная длина пути R , проекция пути иона R_p в мишени и связанное с ним количественно

$$\beta_1(E) = N \left[S_n(E) + S_c(E) - \frac{\mu}{2} \frac{\Omega_n^2(E)}{E} \right], \quad (1.189)$$

$$\Omega_n^2(E) = \int_0^\infty T_n^2 2\pi b db.$$

Стандартное отклонение вычислено по величинам хорды R_c и перпендикуляра R_\perp к направлению движения иона (см. рис. 1.22) из следующего соотношения:

$$\overline{R_c^2} = \overline{R_p^2} + \overline{R_\perp^2}, \quad (1.190)$$

$$\overline{R_r^2} = \overline{R_p^2} + \overline{R_\perp^2}, \quad (1.191)$$

и для случаев, когда $T \ll E$,

$$\overline{R_r^2}(E) = \int_0^E \frac{2\overline{R_p}(E') dE'}{\beta_2(E')} \exp \left[\int_E^{E'} \frac{3\alpha_2(x)}{\beta_2(x)} dx \right] \quad (1.192)$$

и

$$\overline{R_c^2}(E) = \int_0^E \frac{2\overline{R_p}(E') dE'}{N[S_n(E') + S_c(E)]}, \quad (1.193)$$

и затем $\overline{\Delta R_p}$ получено из $(\overline{\Delta R_p})^2 = \frac{2\overline{R_r^2}(E) + \overline{R_c^2}(E)}{3} - (\overline{R_p})^2$, (1.194)

где $\alpha_2(E) = \alpha_1(E)/2$, $\beta_2(E) = \beta_1(E) - \frac{N\mu\Omega_n^2(E)}{E}$.

Интегралы могут быть определены численно для потенциала Ферми — Томаса или аналитически, если приближенные значения S_n и S_c используются вместе со значениями

$$\Omega_n^2(E) = \frac{4M_1M_2}{3(M_1 + M_2)} S_n^0 E. \quad (1.195)$$

Средняя общая длина пути может быть вычислена из

$$\rho_R = \int_0^\epsilon \frac{d\epsilon}{[S_n(\epsilon) + S_c(\epsilon)]} = \int_0^\epsilon \frac{d\epsilon}{[S_n(\epsilon) + k\epsilon^{1/2}]}. \quad (1.196)$$

Это выражение может быть определено численно для различных значений k . Для определенных значений Z_1 , Z_2 и E_i вычисляем ϵ и k , затем получаем величину ρ_R из рис. 1.23 и преобразуем в R , используя уравнения (1.141), (1.137) и $\rho_R = 3,06\epsilon$

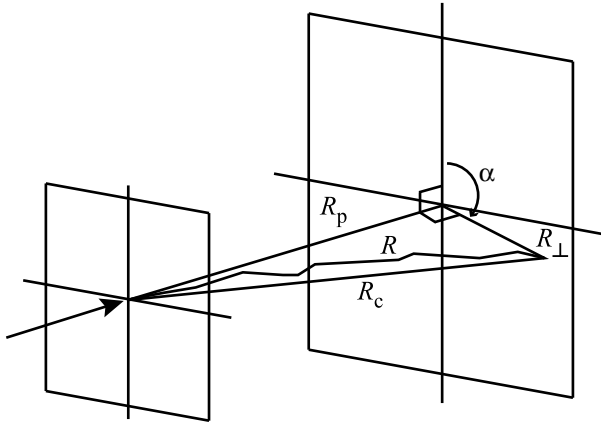


Рис. 1.22. Схема определения параметров пути R , R_p , R_c , R_l .

$$R(nm) = \frac{6EM_2(M_1 + M_2)(Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{1/2}}{\rho Z_1 Z_2 M_1}, \quad (1.197)$$

где E измеряется в кэВ и ρ — в г/см³. Наибольший интерес представляет средняя проекция пути R_p , которая обычно измеряется. При высоких энергиях $S_e \gg S_n$ и $R \sim R_p$. При низких энергиях, когда $S_n \sim S_e$, тогда $R_p < R$. Это различие возрастает с увеличением M_2/M_1 . Теория Линдхарда была также использована для анализа этой проблемы. При низком ϵ или ρ_R (и малых значениях k) имеем

$$\begin{aligned} \text{для } M_2/M_1 = 1/2; & \quad R/R_p \sim 1,2 \text{ (при низком } \epsilon, k) \\ M_2/M_1 = 1; & \quad R/R_p \sim 1,6 \\ \text{и } M_2/M_1 = 2; & \quad R/R_p \sim 2,2. \end{aligned}$$

При высоких энергиях (большой ϵ) $R/R_p \rightarrow 1$ для всех k . Наконец, общее приближение дает [16]

$$\frac{R}{R_p} \cong 1 + B \frac{M_2}{M_1}, \quad (1.198)$$

где B — медленно меняющаяся функция от E и R . В области энергии, когда доминирует остановка ядер и $M_1 > M_2$, $B = 1/3$. Увеличенный вклад процесса остановки электронами при более высоких энергиях приводит к меньшим значениям B . Когда $M_1 < M_2$, большие углы рассеяния увеличивают различия между R и R_p .

Однако для этих столкновений остановка электронами заметна и частично возмещает увеличение различий. Поэтому $B = 1/3$ становится раз-

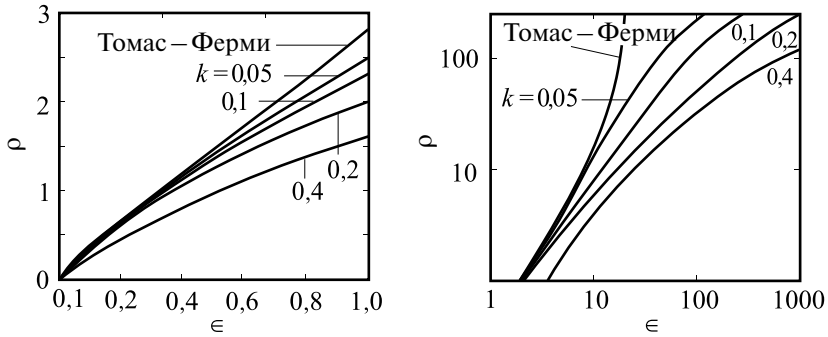


Рис. 1.23. Диаграмма сокращенного диапазона энергий для различных значений параметра остановки электронов k

умным приближением для широкого диапазона условий, приводя к выражению

$$R_p \cong \frac{R}{1 + (M_2 / 3M_1)}. \tag{1.199}$$

Диапазон статистического разброса может быть вычислен, используя теорию Линдхарда. [16]. Для случая, когда доминирует остановка ядер и $M_1 > M_2$, то есть при малом угловом рассеянии, имеем

$$2,5\Delta R_p \cong 1,1R_p \left[\frac{2(M_1 M_2)^{1/2}}{M_1 + M_2} \right], \tag{1.200}$$

или

$$\Delta R_p \cong R_p / 2,5. \tag{1.201}$$

Для высокоэнергетического иона путь, по существу, представляется прямой линией на начальном участке движения, так как остановка электронами мала и рассеяние увеличивается в конце пути из-за столкновений ядер (рис. 1.24а). При более низких энергиях, когда S_n и S_e сопоставимы, ион движется зигзагообразным образом со многими отклонениями пути и уменьшением расстояния между столкновениями вследствие снижения энергии иона и увеличения поперечного сечения (рис. 1.24б).

Позиции остановок подчиняются закону Гаусса как

$$N(x) = N_p e^{-1/2X^2}, \tag{1.202}$$

где $X = (x - R_p) / \Delta R_p$ и ΔR_p — стандартное отклонение (рис. 1.25), если максимальная концентрация N_p при R_p , и затем падает до $1/e^{1/2} N_p$ на расстоянии $x = R_p \pm \Delta R_p$. При рассмотрении мишени в направлении, перпенди-

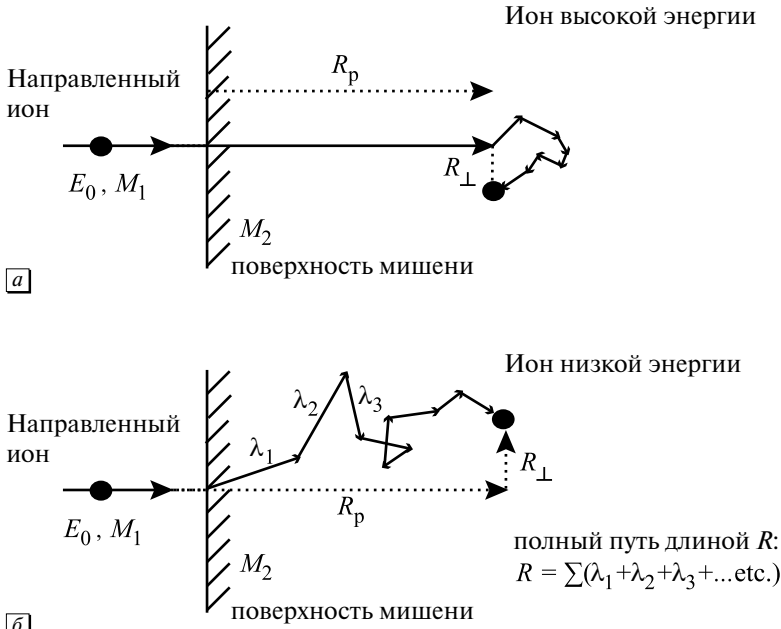


Рис. 1.24. Полный путь, его проекция и диапазон отклонений R_{\perp} при столкновении с атомами мишени (а) для высокоэнергетических ионов и (б) для ионов низкой энергии

кулярном поверхности, число внедренных ионов на единицу площади N_s будет

$$N_s = \int_{-\infty}^{+\infty} N(x) dx, \tag{1.203}$$

так как $dx = \Delta R_p dX$ и гауссовская кривая симметрична, то

$$N_s = 2\Delta R_p N_p \int_0^{\infty} e^{-1/2X^2} dx \tag{1.204}$$

или в другом виде

$$N_s = \Delta R_p N_p \sqrt{2\pi} \left\{ \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^{\infty} e^{-1/2X^2} dX \right\}. \tag{1.205}$$

Интеграл в скобке представляет функцию ошибок, равную единице при $X \rightarrow \infty$. Если N_s представляет число ионов/см², имплантированных в мишень, то имеем

$$N_p = \frac{N_s}{\sqrt{2\pi}\Delta R_p} \cong \frac{0,4N_s}{\Delta R_p}, \tag{1.206}$$

таким образом, плотность внедренных ионов равна

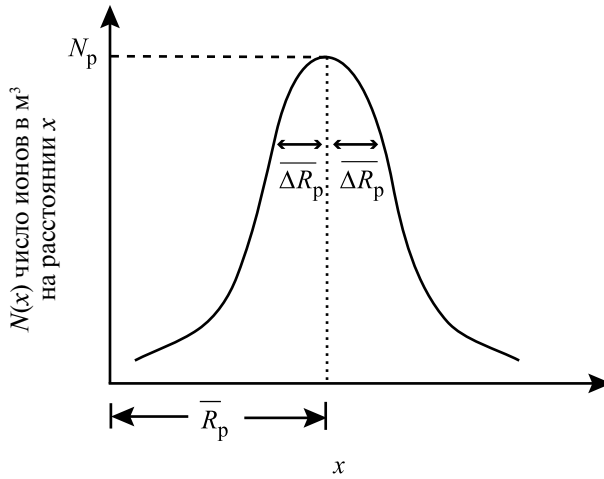


Рис. 1.25. Параметры гауссовского распределения при внедрении иона определяются значениями: проекция пути \bar{R}_p , стандартное отклонение ΔR_p и максимальная концентрация ионов N_p

$$N(x) = \frac{0,4N_s}{\Delta R_p} \exp\left(-1/2\left\{\frac{x - R_p}{\Delta R_p}\right\}^2\right). \quad (1.207)$$

Приведем пример. При внедрении $5 \cdot 10^{15}$ ионов/см² 40 кэВ В в кремний $R_p \sim 160$ нм, $\Delta R_p \sim 54$ нм и $N_p \sim 4 \cdot 10^{20}$ атомов/см². Отметим, что по закону Гаусса концентрация уменьшается на один порядок при $x \approx R_p \pm 2\Delta R_p$ и на 2 порядка при $x \approx R_p \pm 3\Delta R_p$ и т. д.

Используя теоретическую модель LSS для описания остановок за счет электронов и ядер, Литмарк и Зиглер провели расчеты для атомов всех элементов в диапазоне атомных чисел от 1 до 92. Их работа представлена в книге [20]. Для атомов мишени, облучаемых частицами с атомными номерами $1 \leq Z \leq 92$, и в широком диапазоне энергий на графиках представлены средние расстояния проникновения иона, продольного и поперечного его рассеяния. Следующий пример взят из этой книги.

Пример 1.3. Внедрение МэВ He в Si

Зиглер [18] приводит графики и таблицы для широкого диапазона параметров атомов мишени и ионов. При облучении 2 МэВ ионами He кремниевой мишени глубина внедрения ионов составляет 7,32 мкм при разбросе в диапазоне 0,215 мкм соответственно. Если принять дозу облучения He на уровне 10^{15} ионов/см², то расчет по (1.206) приводит к значению концентрационного максимума $\sim 1,86 \cdot 10^{19}$ He

атомов/см³ на глубине 7,32 мкм, что соответствует приблизительно 620 атомов на массу атома. Уравнение (1.207) дает оценку распределения внедренных атомов He в виде

$$N(x) = 1,86 \cdot 10^{19} \exp\left(-1/2 \left\{ \frac{x-7,32}{0,215} \right\}^2\right) \text{He}/\text{см}^3,$$

где x приведен в мкм.

В дополнение к табулированным данным Зиглер разработал на основе метода Монте-Карло компьютерную программу для вычисления переноса ионов в веществе [18]. Программа доступна в сети Интернет по адресу: <http://www.srim.org>, и читателя следует поощрить за апробирование расчетов некоторых примеров с использованием программного обеспечения моделирования SRIM. Эта программа загружается пользователю бесплатно и может свободно быть использована на персональном компьютере. Следующий пример основан на данных, взятых из программы SRIM.

Пример 1.4. Внедрение Al в Ni

Подобный пример представляет случай имплантации более тяжелого элемента, такого как Al, в никелевую мишень при более низкой энергии внедрения. В этом случае также используется вычислительная программа. Облучение 200 кэВ Al в Ni приводит к значениям проекции длины пути ~ 135 нм с продольным разбросом 44 нм. Подставив эту величину в уравнение (1.204), получим максимум концентрации $9,1 \cdot 10^{19}$ Al/см³ для дозы 10^{15} Al⁺/см². Программное вычисление дает идентичное значение. Концентрации ионов в единицах [атом/см³/атомсм²] и диапазон распределения внедренных ионов на графике имеют максимум $\sim 8 \cdot 10^4$ атом/см³/атом/см². Умножая эту величину на дозу 10^{15} Al⁺/см², получим значение $\sim 8 \cdot 10^{19}$ Al/см³, близкое к аналитическому решению.

Обзор главы

Глава началась с описания нейтронно-ядерных столкновений, так как отсутствие заряда у нейтрона позволяет описать взаимодействие, используя приближение твердых сфер. Были проанализированы выражения для

передачи и рассеяния энергии при упругих и неупругих столкновениях по реакциям $(n, 2n)$ и (n, γ) . В табл. 1.2 представлены все выражения по передаче энергии и поперечные сечения передачи энергии для этих видов реакций. Описание взаимодействия частиц с атомами мишени было распространено на изучение столкновений атома с ионами и с атомами, что необходимо для двух важных процессов: при облучении ионами и их внедрении и при взаимодействии атомов в решетке реакторных материалов после начального столкновения с нейтронами. Знание межатомных потенциалов создает основу для описания взаимодействия между атомами, а также для определения поперечных сечений передачи энергии. Табл. 1.3 дает представление о важных потенциалах, используемых для описания этих взаимодействий.

Кинематика столкновений далее использовалась для описания орбит столкнувшихся атомов и, следовательно, процессов переноса энергии и поперечных сечений передачи энергии. Поскольку не существует единого межатомного потенциала для описания взаимодействия по всему диапазону рассеяния энергии, то проанализированы возможности переноса энергии и поперечные сечения на разных энергетических уровнях для различных классов взаимодействий. Резерфордское рассеяние при взаимодействии легких ионов больших энергий, медленных тяжелых ионов и релятивистских электронов в каждом случае рассматривают отдельно. В табл. 1.5 представлены все выражения переноса энергии и значения поперечных сечений передачи энергии для различных межатомных столкновений.

Обсуждается теория энергетических потерь в целях определения потери энергии в кристалле при упругих ядерных столкновениях и столкновениях с электронами мишени. Столкновения рассмотрены в широком диапазоне энергий с различными уровнями энергий торможения, остановки ядер и электронов. В табл. 1.7 приведены выражения для оценки энергии остановки для различных видов взаимодействия. Наконец, выявленные энергии остановок использованы в выражениях для оценки проекции пути ионов в твердых телах и распределения концентрации ионов по глубине их проникновения.

Обозначения

a	Экранированный радиус
a_0	Радиус Бора водородного атома

a_U	Универсальная экранированная длина
A	Масса атома
A	Предэкспоненциальная константа Борна — Майера в уравнении (1.47)
b	Параметр столкновения
B	Константа Борна — Майера в уравнении (1.47)
C	Константа экранированного потенциала Кулона в уравнении (1.49) = 0,8853
c	Скорость света
D	Наименьший интервал между соседними атомами
E_a	Значение E_i при $\rho_0 = a$
E_b	Значение E_i при $T \geq E_d$ и $b = a$
E_d	Энергия смещения
E_D	Максвелловская температура ядра = kT
E_f	Конечная энергия
E_γ	Энергия гамма-измерения
E_i	Энергия налетающей частицы
$E_{v,i}^f$	Энергия формирования вакансий и межузельных атомов
$E_{v,i}^m$	Энергия перемещения вакансий и межузельных атомов
E_m	Кинетическая энергия налетающей частицы в системе СМ
E_m''	Энергия нейтрона после (n, 2n)-реакции
E_M'	Кинетическая энергия частицы мишени в системе СМ
E_M''	Энергия в системе СМ после реакции (n, 2n)
E_R	Энергия Ридберга
E_T	Полная энергия
\bar{I}	Уровень ионизации возбуждения
m	Масса налетающей частицы
M	Масса мишени
N	Атомная плотность
N_p	Максимальная концентрация внедренных ионов
N_s	Плотность внедренных ионов на единицу площади
p_e	Импульс электрона
Q	Энергия возбуждения ядра
r_c	Наименьший интервал между соседними атомами
\dot{r}	Радиальная скорость в полярных координатах
R	Путь иона
R_{eff}	Радиус рекомбинации
R_p	Проекция пути иона

ΔR_p	Стандартное отклонение проекции пути иона
s	Показатель степени
S_e	Энергия остановки электронов
S_n	Энергия остановки ядер
t	Время
t	Безразмерный параметр столкновения в уравнении (1.136)
T	Энергия переноса при столкновении
\bar{T}	Средняя энергия переноса
\hat{T}	Максимальная энергия переноса
\check{T}	Минимальная энергия переноса
T_ℓ	Энергия, переданная атому после реакции (n, 2n)
$V(r)$	Потенциальная энергия
v_e	Скорость налетающей частицы в системе СМ
V_c	Скорость частицы мишени в системе СМ
v'_e	Скорость налетающей частицы в системе СМ после столкновения
V'_e	Скорость атома мишени в системе СМ после столкновения
v''_e	Скорость нейтрона в системе СМ после (n, 2n)-реакции
V''_e	Скорость атома мишени в системе СМ после (n, 2n)-реакции
V_{CM}	Скорость СМ в лабораторной системе
v_ℓ	Скорость налетающей частицы в лабораторной системе координат
v'_ℓ	Скорость поступающей частицы в лабораторной системе после столкновения
V'_ℓ	Скорость атома мишени в лабораторной системе после столкновения
V''_ℓ	Скорость атома мишени в лабораторной системе после реакции (n, 2n)
Z	Атомный номер
β	v/c
$\chi(r)$	Экранированная функция
χ_U	Универсальная экранированная функция
ε	Единичный электрический заряд
ε_0	Электрическая постоянная
ϵ	Безразмерный параметр энергии в уравнении (1.137)
ϕ	Асимптотический угол рассеяния на бесконечном расстоянии
ϕ	Угол рассеяния в системе СМ

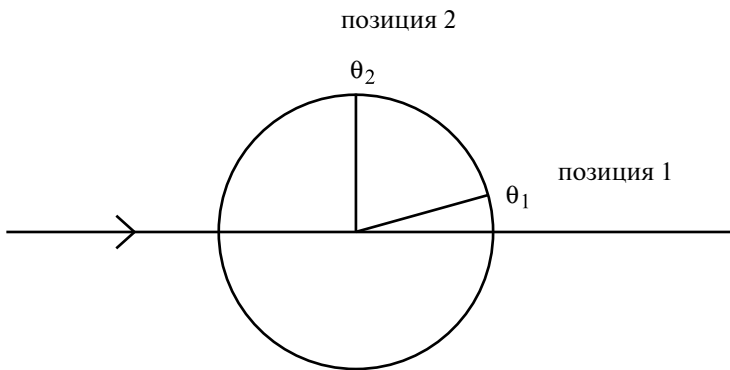
$\dot{\psi}$	Угловая скорость в полярных координатах
ψ	Угол рассеяния смещенного атома в лабораторной системе координат
λ	Средний свободный путь между столкновениями
λ_m	См. уравнение (1.139)
\mathcal{L}	1.309, уравнение (1.138)
μ	Приведенная масса в уравнении (1.63)
$v(T)$	Функция смещения
θ	Угол рассеяния в лабораторной системе координат
ρ	Расстояние между центрами атомов при столкновении
ρ_e	Плотность электронного облака
ρ_0	Приближение для ближайшего расстояния r , когда $\psi = \pi/2$
ρ_r	Безразмерный параметр расстояния в уравнении (1.141)
$\sigma(E_i)$	Полное поперечное сечение столкновения атомов
$\sigma(E_i, T)$	Дифференциальное поперечное сечение передачи энергии
$\sigma(E_i, \phi)$	Дифференциальное угловое поперечное сечение столкновения
$\sigma(E_i, E_0, \Omega)$	Двойное дифференциальное поперечное сечение столкновения
$\sigma(E_i, Q_j, \phi)$	Дифференциальное угловое поперечное сечение для неупругих столкновений
$\sigma(E_i, Q_j, T)$	Дифференциальное поперечное сечение передачи энергии для неупругих столкновений
Ω	Телесный угол рассеяния налетающей частицы
$d\Omega$	Дифференциальное сечение телесного угла
ξ_e	$Z_1^{1/6}$

Задачи

- 1.1 0,5 МэВ нейтрон соударяется с атомом мишени массой A , который изначально находится в покое. Вычислите скорость и энергию обеих частиц в лабораторной системе после лобового столкновения для $A = 27$ (Al) и $A = 207,2$ (Pb).
- 1.2 Датчик 100%-й эффективности (то есть каждая частица, входящая в датчик, регистрируется), источник площадью 1 см^2 помещен на расстояние r от мишени (нулевого измерения, то есть точечный). Мишень облучается нейтронами. Предположим, что происходит

только упругое рассеяние и что рассеяние азимутально симметрично, а поперечное сечение рассеяния изотропно:

- Каково отношение числа частиц, обнаруженных датчиком, в положениях 1 и 2, показанных на рисунке?
- Каково отношение числа частиц, рассеянных при приращении угла на 10° , около $\theta_1 = 5^\circ$ и $\theta_2 = 85^\circ$?
- Повторите задачи (а) и (б), предполагая вместо изотропного изменение дифференциального поперечного сечения рассеяния в виде $\sigma_s(E_i, \theta) = \cos\theta$.



$d\theta$ = приращение угла рассеяния

$d\Omega$ = приращение телесного угла θ

θ = угол рассеяния в системе центра масс

- 1.3 Пластина Ti облучается потоком нейтронов 10^{14} н/см² в секунду перпендикулярно к поверхности.

- рассчитайте число частиц, рассеянных в секунду при

1) $85^\circ \leq \theta = 86^\circ$ и

2) для $5^\circ \leq \theta = 6^\circ$.

Размер пластины 1 см^2 , толщина $0,6 \text{ мм}$. Рассеяние изотропно, полное поперечное сечение рассеяния $2,87 \text{ barns}$ ($1 \text{ барн} = 10^{-24} \text{ см}^2$).

- Та же самая мишень облучается частицами таким образом, что дифференциальное угловое поперечное сечение рассеяния пропорционально θ^2 . Вычислите отношение атомного потока в интервале (1) по сравнению с интервалом (2).

В обоих случаях произведите полное интегрирование дифференциального поперечного сечения.

- Аппроксимируйте интеграл в (б), приняв угловое дифференциальное рассеяние поперечного сечения постоянным в каж-

дом интервале интегрирования и равным значению в центре интервала.

- 1.4 Определите кинематический фактор K , представляемый в виде $K = E_f/E_i$, где E_i — энергия частицы перед столкновением, а E_f — энергия частицы после столкновения.

- 1.5 Последующая формула связывает углы рассеяния θ и ϕ в лабораторной системе и в системе центра масс соответственно:

$$\tan\theta = (M/m)\sin\phi/[1 + (M/m)\cos\phi],$$

где m и M являются массами частицы и мишени соответственно. Обсудите это выражение для следующих трех случаев: $m = M$, $m \gg M$ и $m \ll M$.

Получите значения из уравнения (1.24).

Получите значения из уравнения (1.29).

- 1.8 Для двух столкнувшихся частиц запишите выражения:

- а) E_T — полная энергия системы n частиц,
 б) E_{CM} — энергия центра масс (определяемая значением V_{CM} и полной массой системы),
 в) E — полная энергия в системе СМ. Покажите, что $E = E_T - E_{CM}$ из уравнения (1.61)).

- 1.9 Получите соотношение между b и ϕ из уравнения (1.76) для потенциала твердых сфер:

$$\begin{aligned} V_{HS}(r) &= 0 & r &\geq r_0, \\ V_{HS}(r) &= \infty & r &\leq r_0. \end{aligned}$$

Удостоверьтесь, что Ваш ответ правилен для $b > r_0$.

- 1.10 Убедитесь, что для описания межатомного взаимодействия в промежуточных состояниях, то есть при кулоновском отталкивании и отталкивании закрытых оболочек, часто возможно использование обратного потенциала энергии в виде

$$V(r) = \text{constant}/r^n.$$

Например, функция может соответствовать обратному квадрату ($n = 2$) экранированного потенциала Кулона при $r = a$, получив тот же наклон, координату и кривизну.

Эта функция представлена в следующем виде:

$$V(r) = z_1 z_2 e^3 a / (r^2 \exp[1]).$$

Определите выражения поперечного сечения $\sigma_s(E_i, T)$ и $\sigma_s(E_i, \phi)$ для межатомного взаимодействия с функцией обратного квадратного потенциала.