Вестник
МОСКОВСКОГО УНИВЕРСИТЕТА
№ 6 — 1974

УДК 539.2 : 539.16.04

Б. Я. ЮРКОВ

# ТЕОРИЯ КАСКАДА ПРИ НИЗКИХ ЭНЕРГИЯХ ПЕРВИЧНОГО СМЕЩАЕМОГО АТОМА

Многочастичному характеру взаимодействия атомов в решетке ставится в соответствие приближение непрерывной потери энергии движущимся через решетку атомом. Решение уравнения Льюиса—Спенсера дает распределение атомов $m$-го поколения каскада по энергиям, равное при пороговой энергии образования радиационного дефекта их числу. Вычисления находятся в хорошем согласии с результатами, полученными по методу Виньярда.

Энергии атомов, участвующих в каскаде, обычно сравнимы с энергией связи атома в решетке, поэтому образование каскада корректно рассматривать можно только в многочастичном приближении. С этой целью Виньярдом и др. [1, 2, 3] был предложен метод моделирования процессов в кристаллической решетке с помощью электронно-вычислительных машин. При этом предполагалось, что каждый атом модели взаимодействует со всеми другими атомами на основе законов классической механики. Исследование каскада смещаемых атомов (в железе) проводилось в интервале энергии первичного смещаемого атома до 1500 *эв* [4]. Число атомов, смещенных из своих мест в решетке (и равное числу вакансий), $\nu$ в зависимости от начальной энергии первичного смещенного атома $W_0$ представлено на рисунке крестиками. Эта зависимость аппроксимируется линейной зависимостью с коэффициентом 1/100, если прямую провести через 7 точек из 12, или же с коэффициентом 1/110, если прямую определить по методу наименьших квадратов и провести через начало координат.

Существующие аналитические теории каскада также приводят к линейной зависимости вида

$$\nu = \frac{k}{2W_l} W_0,$$

где $W_l$ — минимальная энергия, необходимая для образования устойчивой пары вакансия — внедренный атом. В ранних теориях оказывалось, что $k=1$, а поскольку для железа $W_l=18$ *эв* [4], то получается заметное расхождение в наклонах прямой. В других теориях [5, 6] (при $k=1$) за $W_l$ принималась такая энергия, при которой вероятность образования пары равна $1/2$. Для железа такая вероятность имеет место при 39 *эв*, поэтому расхождение уменьшается. В более поздних теориях

каскада [7], использовавших потенциалы взаимодействия между атомами, близкие к реальным, коэффициент $k$ значительно уменьшался (до $k=0{,}52$ у Сандерса), что также приводит к уменьшению расхождения. Наконец, Робинсон [8] и Кумахов [9] величину $k$ получают как функцию энергии $W_0$, уменьшающуюся с ростом $W_0$. Это позволяет Робинсону [8] (но при энергиях $W_0$, больше рассматриваемых в [4]) достичь согласия с машинным расчетом Билера и Беско [10] в отношении наклона прямых для зависимости $\nu(W_0)$. Однако остается расхождение примерно в два раза в значениях самих величин.

Ввиду вышеизложенного нам представляется, что расхождение между результатами, полученными из моделирования процесса каскада и следующими из аналитического решения, имеет фундаментальную причину и требует новых исходных предпосылок.

Для рассмотрения каскада с новых позиций обратим внимание на два результата, полученные в [4] при изучении изменения потенциальной энергии решетки в процессе развития каскада. Оказалось, во-первых, что из-за того, что каждый атом взаимодействует со всеми своими соседями, кинетическая энергия движущегося в решетке атома очень быстро расходуется на колебания решетки; и, во-вторых, в актах соударения атомов, приводящих к развитию каскада, фактически участвуют только два атома, причем приближение твердых шаров является явно непригодным. Эти два факта мы и положим в основу новой теории каскада.

1. Из-за большого количества атомов решетки, участвующих в торможении движущегося атома, и значительного вклада потерь энергии на колебания решетки допустимо приближение непрерывной потери энергии движущимся атомом [9, 11, 12], т. е. существует взаимно-однозначное соотношение между энергией $W$ любого участвующего в каскаде атома и его реальным (криволинейным) остаточным пробегом $r$. Таким образом, непрерывная потеря энергии движущимся атомом ставится в соответствие многочастичному характеру взаимодействия атомов в решетке.

Пусть $r_0$ — криволинейный остаточный пробег первичного смещаемого атома, получившего энергию $W_0$ от проникающей быстрой частицы (электрон, протон и т. д.) с начальной энергией $E_0$. Тогда можно ввести приведенный остаточный пробег атома любого $m$-го поколения:

$$\rho_m = \frac{r_m}{r_0}.$$

Используя приближение непрерывной потери энергии, можно далее написать кинетическое уравнение Льюиса [13] для любого атома, движущегося через кристаллическую решетку. При этом нас не будет интересовать угловая зависимость, а нужно только знать функцию распределения атомов $I_m\ (W_m)$ по энергиям $W_m$ в процессе их замедления. Вместо моноэнергетического источника, обычно рассматриваемого в задачах проникновения быстрых частиц в вещество, в случае каскада имеется некоторое распределение атомов по энергиям $Q_m\ (W_m)$, получающееся в результате выбивания из узлов решетки, например, вторичных ($m=2$) смещаемых атомов первичным ($m=1$) смещаемым атомом. Решение кинетического уравнения Льюиса методом моментов по Спенсеру [14] приводит в данном случае к простому дифференциальному уравнению

$$-\frac{d\,I_m(W_m)}{dW_m} = Q_m(W_m)\left(\frac{dW_m}{d\rho_m}\right)^{-1}, \qquad (1)$$

где $\left(\frac{dW_m}{d\rho_m}\right)$ — тормозная способность вещества по отношению к движущемуся атому $m$-го поколения. Для определения ее природы воспользуемся известным правилом Динса и Виньярда [15]: «Независимо от вещества, в котором движется атом, ионизация не имеет значения, если энергия движущегося атома, выраженная в кэв, меньше, чем его атомный вес». Поскольку атомный вес железа $A \approx 56$ *г/моль*, то весь интересующий нас интервал энергий $W_0 \leqslant 1{,}5$ *кэв* лежит в области преобладания потерь энергии на упругие соударения. Согласно Линдхарду и Шарффу [16], при $M_1 = M_2$, $Z_1 = Z_2$ имеем

$$\left(\frac{dW}{d\rho}\right)_\nu = r_0 \frac{N}{A} \cdot \frac{\pi^2}{\sqrt{2}} \cdot \frac{a_0^2 Ry Z^{5/3}}{2{,}7183} = C_1. \tag{2}$$

Здесь $N$ — число Авогадро, $a_0$ — радиус первой боровской орбиты, $Ry$ — постоянная Ридберга.

2. Ввиду того что в соударениях атомов, приводящих к каскаду, участвуют фактически только два атома, можно воспользоваться всеми результатами приближения парного взаимодействия. А именно, если энергия движущегося атома меньше граничной

$$W_\zeta = \frac{4\sqrt{2}}{0{,}8853} Ry Z^{7/3},$$

то поперечное сечение упругого рассеяния не подчиняется закону Резерфорда. Ранее для этой области энергий ($W < W_\zeta$) использовалось приближение твердых шаров. Учитывая результат «математических экспериментов» [4], мы будем пользоваться выражением Линдхарда и Шарффа [16] (для нашего случая $M_1 = M_2$, $Z_1 = Z_2$):

$$d\sigma = \frac{C_2}{W_{m-1}^{1/2}} \cdot \frac{dW_m}{W_m^{3/2}}, \tag{3}$$

где

$$C_2 = \frac{\pi^2}{2\sqrt{2}} \cdot \frac{a_0^2 Ry}{2{,}7183} Z^{5/3}.$$

Очевидно, что здесь в качестве первичных и вторичных атомов могут выступать атомы любых $(m-1)$ и $m$-поколений. Если умножить теперь поперечное сечение (3) на число атомов в 1 *г*, равное $\frac{N}{A}$, и на максимальный пробег $r_0$ в *г/см*$^2$, то получим число смещенных атомов $m$-го поколения с энергиями в интервале $(W_m, W_m + dW_m)$:

$$\frac{dS(W_{m-1}, W_m)}{dW_m} = r_0 \frac{N}{A} \frac{C_2}{W_{m-1}^{1/2}} \frac{1}{W_m^{3/2}}.$$

Будем считать, как это общепринято в ядерной физике, тот атом первичным после соударения, который имеет бóльшую энергию. Пусть известно распределение по энергиям смещаемых атомов $(m-1)$-го поколения $I_{m-1}(W_{m-1})$. Тогда в моменты рождения атомов $m$-го поколения их число на интервале $(W_m, W_m + dW_m)$ равно $(m \geqslant 2)$

$$Q_m(W_m) = \int\limits_{2W_m}^{\frac{W_0}{2^{m-2}}} \left[\frac{dS(W_{m-1}, W_m)}{dW_m}\right] I_{m-1}(W_{m-1})\, dW_{m-1}. \tag{4}$$

Здесь верхний предел интегрирования берется с учетом того, что $m$-ый атом может иметь максимум половину начальной (в момент соударения) энергии $(m-1)$-го атома; нижний предел определяется минимумом энергии $(m-1)$-го атома, необходимой для сообщения $m$-му атому энергии $W_m$.

Производя в (4) замену переменного

$$W_{m-1} = 2\chi,$$

имеем

$$Q_m(W_m) = 2 \int\limits_{W_m}^{\frac{W_0}{2^{m-1}}} \left[ \frac{dS(2\chi, W_m)}{dW_m} \right] I_{m-1}(2\chi)\, d\chi, \quad (m \geqslant 2). \tag{5}$$

Проинтегрируем теперь (1):

$$I_m(W_m) = \int\limits_{W_m}^{\frac{W_0}{2^{m-1}}} Q_m(W'_m) \left( \frac{dW'_m}{d\rho_m} \right)^{-1} dW'_m$$

и подставим сюда выражение (5). Изменив порядок интегрирования, имеем

$$I_m(W_m) = 2 \int\limits_{W_m}^{\frac{W_0}{2^{m-1}}} I_{m-1}(2\chi) \left\{ \int\limits_{W_m}^{\chi} \left[ \frac{dS(2\chi, W'_m)}{dW'_m} \right] \left( \frac{dW'_m}{d\rho_m} \right)^{-1} dW'_m \right\} d\chi. \tag{6}$$

При этом внутренний интеграл с учетом (2) равен

$$\frac{1}{C_1} \int\limits_{W_m}^{\chi} \left[ \frac{dS(2\chi, W'_m)}{dW'_m} \right] dW'_m = r_0 \frac{N}{A} \cdot \frac{C_2}{C_1} \cdot \frac{2}{(2\chi)^{1/2}} \left[ \frac{1}{W_m^{1/2}} - \frac{\sqrt{2}}{(2\chi)^{1/2}} \right].$$

Вместо (6) имеем окончательно

$$I_m(W_m) = \int\limits_{2W_m}^{\frac{W_0}{2^{m-2}}} I_{m-1}(W_{m-1}) \left[ \frac{1}{(W_{m-1} W_m)^{1/2}} - \frac{\sqrt{2}}{W_{m-1}} \right] dW_{m-1}, \quad (m \geqslant 2) \tag{7}$$

так как

$$2r_0 \frac{N}{A} \cdot \frac{C_2}{C_1} = 1.$$

При $W_m = W_l$ решение (7) дает число атомов $m$-го поколения, имеющих энергию устойчивого дефекта решетки. Следуя [4], мы примем, что распределение первичных смещенных атомов $I_1(W_1)$ равно нулю при пороговой энергии $W_l = 18$ *эв*, достигает значения 0,5 при $W_1 \approx 40$ *эв*, значения 0,75 — при $W_1 \approx 60$ *эв* и становится равным единице при $W_1 \geqslant 100$ *эв*. Для следующих поколений при $I_1(W_1) = 1$ имеем

$$I_2(W_l) = \sqrt{2} \left[ 2 \left( \sqrt{\frac{W_0}{2W_l}} - 1 \right) - \ln \frac{W_0}{2W_l} \right];$$

$$I_3(W_l) = 4\left(\sqrt{\frac{W_0}{4W_l}} + 2\right)\ln\frac{W_0}{4W_l} -$$

$$-24\left(\sqrt{\frac{W_0}{4W_l}} - 1\right) + \left(\ln\frac{W_0}{4W_l}\right)^2;$$

$$I_4(W_l) = 2\sqrt{2}\left[80\left(\sqrt{\frac{W_0}{8W_l}} - 1\right) - 8\left(2\sqrt{\frac{W_0}{8W_l}} + 3\right)\ln\frac{W_0}{8W_l} +\right.$$

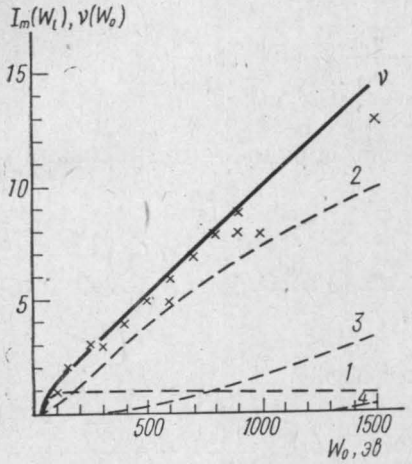
$$\left. + \left(\sqrt{\frac{W_0}{8W_l}} - 3\right)\left(\ln\frac{W_0}{8W_l}\right)^2 - \frac{1}{6}\left(\ln\frac{W_0}{8W_l}\right)^3\right]$$

и т. д.

На рисунке представлены результаты расчета по этим формулам. Сумма числа смещенных атомов по всем четырем поколениям (при $W_0 \geqslant 100$ *эв*) представляет собой линейную зависимость с коэффициентом наклона прямой, равным приблизительно 1/104. Из полученных результатов видно, что отношение энергии, затраченной на образование дефектов, к полной энергии первичного смещаемого атома

$$\frac{\nu \cdot W_l}{W_0} = \frac{18}{104}$$

составляет 17%. Эта величина и определяет ошибку, которую мы допускаем, предполагая непрерывность потерь энергии движущимся первичным смещаемым атомом. Из того же рисунка видно, что для второго и третьего поколения атомов каскада приближение непрерывных потерь энергии выполняется лучше.




Число смещенных атомов в каскаде в зависимости от энергии первичного смещаемого атома. *1*, *2*, *3* и *4* соответствуют поколениям каскада, сплошная линия — их сумма, экспериментальные точки даны согласно [4]

Автор благодарен Ю. В. Булгакову, М. А. Кумахову и В. С. Николаеву за полезные критические замечания. Численные расчеты были проведены Н. Н. Казаковой, за что автор также выражает ей благодарность.

## ЛИТЕРАТУРА

1. Gibson J. B., Goland A. N., Milgram M., Vineyard G. H. Phys. Rev., **120**, 1229, 1960.
2. Виньярд Дж. «Успехи физических наук», **74**, 435, 1961.
3. Erginsoy C., Vineyard G. H., Englert A. Phys. Rev., **133**, A595, 1964.
4. Erginsoy C., Vineyard G. H., Shimizu A. Phys. Rev., **139**, A118, 1965.
5. Sampson J. B., Hurwitz H., Clancy E. F. Phys. Rev., **99**, 1657, 1955.
6. Snyder W. S., Neufeld J. Phys. Rev., **103**, 862, 1957.
7. Томпсон М. Дефекты и радиационные повреждения в металлах. М., 1971.
8. Robinson M. T. Phil. Mag., **12**, 741, 1965.
9. Кумахов М. А. Phys. Lett., **29A**, 243, 1969.
10. Beeler J. R., Besco D. G. Phys. Rev., **134**, A530, 1964.
11. Lindhard J., Nielsen V., Scharff M., Thomsen P. V. Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk., **33**, No. 10, 1963.

12. Ленченко В. М., Акилов Ф. З. «Физика и техника полупроводников», **5**, 397, 1971.
13. Lewis H. W. Phys. Rev., **78**, 526, 1950.
14. Spencer L. V. Phys. Rev., **98**, 1597, 1955.
15. Динс Дж., Виньярд Дж. Радиационные эффекты в твердых телах. М., 1960.
16. Lindhard J., Scharff M. Phys. Rev., **124**, 128, 1961.

Поступила в редакцию
14.2 1973 г.

НИИЯФ