

НЕСТАЦИОНАРНОЕ ПРОСТРАНСТВЕННО-ЭНЕРГЕТИЧЕСКОЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЕ КАСКАДА ВЫБИТЫХ АТОМОВ В ТВЕРДОМ ТЕЛЕ

Е. В. Метелкин^{a}, В. А. Акатьев^b, В. И. Шмырев^a, Е. Ю. Барышева^b*

*^a Российский государственный социальный университет
129226, Москва, Россия*

*^b Московский государственный технический университет им. Н. Э. Баумана
105005, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 8 февраля 2019 г.,
после переработки 8 февраля 2019 г.
Принята к публикации 29 марта 2019 г.

Рассматривается развитие каскада атомных столкновений в твердом теле, состоящем из одинаковых атомов. Найдено решение кинетического уравнения Больцмана, описывающее нестационарное пространственно-энергетическое распределение замедляющихся атомов с учетом их размножения. Предполагается, что рассеяние атомов является упругим, сферически-симметричным в системе центра масс, а сечение рассеяния постоянно. Отдельные частные случаи этого решения совпадают с результатами, полученными ранее.

DOI: 10.1134/S0044451019090013

1. ВВЕДЕНИЕ

Создание ядерных реакторов и проектирование будущих термоядерных установок тесно связано с проблемой выбора для них радиационно-стойких материалов, поскольку их корпуса и отдельные элементы должны выдерживать продолжительное воздействие радиации. Именно радиационная стойкость материала во многом определяет время жизни установок и многие другие их физические характеристики.

Облучение твердых тел быстрыми частицами (особенно нейтронами) приводит к тому, что атомы кристаллической решетки, получившие от налетающей частицы энергию, большую некоторой пороговой величины, вылетают из своих равновесных положений. Дальнейший обмен энергией между движущимися атомами и атомами, находящимися в узлах кристаллической решетки, приводит к появлению новых поколений выбитых атомов. В результате возникает так называемый каскад атомных столкновений. В результате развития каскада

в твердом теле образуются первичные точечные дефекты: вакансии и межузельные атомы, определяющие степень повреждения материала и его дальнейшие физические свойства [1, 2]. В связи с этим исследование энергетического распределения каскада атомных столкновений и его развития во времени представляет большой интерес.

Исследованию развития каскадов атомных столкновений в твердом теле было посвящено достаточно большое количество работ [3–9]. В работе [3] с помощью построенной модельной индикатрисы рассеяния было получено приближенное стационарное энергетическое распределение каскада движущихся атомов для произвольных потенциалов межатомного взаимодействия. В работах [4, 5] анализировалась возможность образования субкаскадов — ряда неперекрывающихся между собой областей в процессе развития каскада атомных столкновений. Оценка пороговой энергии образования субкаскадов была проведена в работе [6]. В работе [7] была разработана теоретическая модель для исследования образования каскадов и субкаскадов атомных столкновений в облучаемых твердых телах, основанная на использовании линейного кинетического уравнения Больцмана. На основе расширенного толкования понятия первично

* E-mail: sitech47@mail.ru

выбитый атом (ПВА) в работе [7] был сформулирован критерий для определения пороговой энергии образования субкаскадов в твердом теле и получены формулы для определения их числа и средних размеров в зависимости от энергии ПВА. На основе результатов, представленных в [7], в работе [8] были проведены численные расчеты для конкретных материалов, согласующиеся с экспериментальными данными.

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

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

В работе [13] было получено точное решение кинетического уравнения Больцмана, описывающее нестационарное энергетическое распределение каскада движущихся атомов с учетом их размножения. Предполагалось, что рассеяние движущихся атомов является упругим и сферически-симметричным в системе центра инерции, сечение взаимодействия — постоянная величина, а энергии связи атомов в узлах решетки не учитывалась.

В настоящей работе на основе использования таких же предположений определяется решение кинетического уравнения Больцмана для функции распределения, описывающей нестационарное пространственно-энергетическое распределение каскада движущихся атомов с учетом их размножения.

Преимущество использованных приближений состоит в том, что в этом случае удается найти решение кинетического уравнения и получить простые аналитические формулы для функции распределения, позволяющие проанализировать основные особенности развития каскада атомных столкновений. Кроме того, с помощью полученных результатов можно оценивать точность различных приближенных решений.

2. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Рассмотрим распространение каскада выбитых атомов в твердом теле. Будем предполагать, что твердое тело состоит из одинаковых атомов, энергией связи которых в узлах решетки (ε_d) будем пренебрегать ($\varepsilon_d = 0$). Будем, кроме того, предполагать, что рассеяние движущихся атомов на атомах, находящихся в узлах решетки, является сферически-симметричным в системе центра масс, а полное сечение рассеяния является постоянным.

Кинетическое уравнение Больцмана, описывающее этот процесс, имеет следующий вид [7, 14]:

$$\begin{aligned} \frac{1}{v} \frac{\partial}{\partial t} \Phi(\mathbf{r}, E, \boldsymbol{\Omega}, t) + \boldsymbol{\Omega} \nabla \Phi(\mathbf{r}, E, \boldsymbol{\Omega}, t) + \\ + \Sigma(E) \Phi(\mathbf{r}, E, \boldsymbol{\Omega}, t) = \int d\boldsymbol{\Omega}' \int dE' \Sigma(E') \times \\ \times P(E' \rightarrow E, \boldsymbol{\Omega}' \boldsymbol{\Omega}) \Phi(\mathbf{r}, E', \boldsymbol{\Omega}', t) + \\ + \int d\boldsymbol{\Omega}' \int dE' \Sigma(E') P(E' \rightarrow E' - E, \boldsymbol{\Omega}' \boldsymbol{\Omega}) \times \\ \times \Phi(\mathbf{r}, E', \boldsymbol{\Omega}', t) + S(\mathbf{r}, E, \boldsymbol{\Omega}, t), \quad (1) \end{aligned}$$

где $\Phi(\mathbf{r}, E', \boldsymbol{\Omega}, t) = v f(\mathbf{r}, E', \boldsymbol{\Omega}, t)$ — поток атомов, $f(\mathbf{r}, E', \boldsymbol{\Omega}, t)$ — функция распределения движущихся атомов, v — скорость атома, $\boldsymbol{\Omega}$ — единичный вектор в направлении его движения, $P(E' \rightarrow E, \boldsymbol{\Omega}' \boldsymbol{\Omega}) = \Sigma(E' \rightarrow E, \boldsymbol{\Omega}' \boldsymbol{\Omega}) / \Sigma(E')$ — индикатриса рассеяния, $\Sigma(E' \rightarrow E, \boldsymbol{\Omega}' \boldsymbol{\Omega})$ — макроскопическое сечение рассеяния атома с энергией E' и направлением движения $\boldsymbol{\Omega}'$ в интервал энергий и углов $[E, E + dE, \boldsymbol{\Omega}, \boldsymbol{\Omega} + d\boldsymbol{\Omega}]$, $\Sigma(E')$ — полное сечение рассеяния, $S(\mathbf{r}, E, \boldsymbol{\Omega}, t)$ — функция источника.

В случае упругого сферически-симметричного в системе центра масс рассеяния движущихся атомов на покоящихся свободных ($\varepsilon_d = 0$) атомах твердого тела индикатриса рассеяния имеет вид [14]

$$P(E' \rightarrow E, \boldsymbol{\Omega}' \boldsymbol{\Omega}) = \frac{1}{2\pi E'} \delta \left[(\boldsymbol{\Omega}' \boldsymbol{\Omega}) - \sqrt{\frac{E}{E'}} \right], \quad (2)$$

где $\delta(z)$ — дельта-функция Дирака. Интегрирование выражения (2) по $d\Omega$ приводит к следующему результату [14]:

$$P_0(E' \rightarrow E) = \int d\Omega P(E' \rightarrow E, \Omega' \Omega) = \frac{1}{E'} \theta(E' - E), \quad (3)$$

где $\theta(z)$ — единичная функция Хевисайда.

Первый интеграл, стоящий в правой части кинетического уравнения (1), описывает переход движущегося атома с энергией E' в состояние с энергией E . При этом выбитый атом получает кинетическую энергию $E' - E$. Второй интеграл учитывает образование выбитого атома с энергией E , когда движущийся атом перешел из состояния с энергией E' в состояние с энергией $E' - E$. Если второй интеграл в правой части уравнения (1) не учитывать, то получим обычное уравнение замедления частиц [14].

Решение кинетического уравнения (1) будем определять в P_1 -приближении, предполагая, что в разложении функции распределения в ряд по сферическим гармоникам относительно вектора Ω можно ограничиться лишь двумя первыми членами [14]:

$$\Phi(\mathbf{r}, E, \Omega, t) = \frac{1}{4\pi} [\Phi_0(\mathbf{r}, E, t) + 3\Omega \cdot \Phi_1(\mathbf{r}, E, t)]. \quad (4)$$

Здесь функции $\Phi_0(\mathbf{r}, E, t)$ и $\Phi_1(\mathbf{r}, E, t)$ представляют собой поток и ток частиц:

$$\begin{aligned} \Phi_0(\mathbf{r}, E, t) &= \int d\Omega \Phi(\mathbf{r}, E, \Omega, t), \\ \Phi_1(r, E, t) &= \int d\Omega \Omega \Phi(\mathbf{r}, E, \Omega, t). \end{aligned} \quad (5)$$

Возможность и оправданность этого приближения подробно проанализированы в [14].

Подставив выражение (4) в уравнение (1) и проинтегрировав полученное уравнение по $d\Omega$ с весом 1 и Ω , получим систему уравнений для определения функций $\Phi_0(\mathbf{r}, E, t)$ и $\Phi_1(\mathbf{r}, E, t)$:

$$\begin{aligned} \frac{1}{v} \frac{\partial}{\partial t} \Phi_0(\mathbf{r}, E, t) + \text{div} \Phi_1(\mathbf{r}, E, t) + \Sigma(E) \Phi_0(\mathbf{r}, E, t) = \\ = \int dE' \Sigma(E') P_0(E' \rightarrow E) \Phi_0(\mathbf{r}, E', t) + \int dE' \Sigma(E') \times \\ \times P_0(E' \rightarrow E' - E) \Phi_0(\mathbf{r}, E', t) + S_0(\mathbf{r}, E, t), \end{aligned} \quad (6)$$

$$\begin{aligned} \frac{1}{v} \frac{\partial}{\partial t} \Phi_1(\mathbf{r}, E, t) + \frac{1}{3} \nabla \Phi_0(\mathbf{r}, E, t) + \Sigma(E) \Phi_1(\mathbf{r}, E, t) = \\ = \int dE' \Sigma(E') P_1(E' \rightarrow E) \Phi_1(\mathbf{r}, E', t) + \int dE' \Sigma(E') \times \\ \times P_1(E' \rightarrow E' - E) \Phi_1(\mathbf{r}, E', t) + \mathbf{S}_1(\mathbf{r}, E, t), \end{aligned} \quad (7)$$

где

$$\begin{aligned} P_0(E' \rightarrow E) &= \int d\Omega P(E' \rightarrow E, \Omega' \Omega), \\ P_1(E' \rightarrow E) &= \int d\Omega (\Omega' \Omega) P(E' \rightarrow E, \Omega' \Omega), \end{aligned} \quad (8)$$

и

$$\begin{aligned} S_0(\mathbf{r}, E, t) &= \int d\Omega S(\mathbf{r}, E, \Omega, t), \\ \mathbf{S}_1(\mathbf{r}, E, t) &= \int d\Omega \Omega S(\mathbf{r}, E, \Omega, t). \end{aligned} \quad (9)$$

Система уравнений (6), (7) совместно с выражением (3) представляет собой «строгое» P_1 -приближение [14].

Несмотря на использование довольно сильного упрощающего предположения (4), решение системы (6), (7) остается достаточно сложной задачей, требующей дальнейших упрощений. Следующим приближением, значительно облегчающим решение поставленной задачи, является отбрасывание производной по времени от тока частиц в уравнении (7) (подробное обсуждение см. в [14]) и использование транспортного приближения [14], основанного на предположении, что можно пренебречь изменением энергии частиц за счет первого углового момента индикатрисы рассеяния, т. е. что можно положить

$$P_1(E' \rightarrow E) = \bar{\mu}_l \delta(E - E'), \quad (10)$$

где $\bar{\mu}_l$ — средний косинус угла рассеяния частицы в лабораторной системе координат (в нашем случае $\bar{\mu}_l = 2/3$, см. (2)).

При использовании перечисленных предположений второй интеграл в правой части уравнения (7) обращается в нуль, и мы получаем

$$\begin{aligned} \Phi_1(\mathbf{r}, E, t) = -\frac{1}{3\Sigma_{tr}(E)} \nabla \Phi_0(\mathbf{r}, E, t) + \\ + \frac{1}{\Sigma_{tr}(E)} \mathbf{S}_1(\mathbf{r}, E', t), \end{aligned} \quad (11)$$

где $\Sigma_{tr}(E) = (1 - \bar{\mu}_l)\Sigma(E)$ — транспортное сечение.

В случае точечного импульсного изотропного моноэнергетического источника,

$$S(\mathbf{r}, E, \Omega, t) = \frac{N_0}{4\pi} \delta(\mathbf{r}) \delta(t) \delta(E - E_0) \quad (12)$$

(N_0 — число ПВА), с которым мы будем иметь дело в дальнейшем, функции S_0 и \mathbf{S}_1 принимают вид

$$\begin{aligned} S_0(\mathbf{r}, E, t) &= N_0 \delta(\mathbf{r}) \delta(t) \delta(E - E_0), \\ \mathbf{S}_1(\mathbf{r}, E, t) &= 0, \end{aligned} \quad (13)$$

а соотношение (11) совпадает с известным законом Фика.

Подставляя соотношение (11) в уравнение (6) и учитывая (13), получим кинетическое уравнение для определения нестационарного пространственно-энергетического распределения потока замедляющихся атомов с учетом их размножения:

$$\begin{aligned} \frac{1}{v} \frac{\partial}{\partial t} \Phi_0(\mathbf{r}, E, t) - \frac{1}{3\Sigma_{tr}} \Delta \Phi_0(\mathbf{r}, E, t) + \\ + \Sigma(E) \Phi_0(\mathbf{r}, E, t) = \int dE' \Sigma(E') P_0(E' \rightarrow E) \times \\ \times \Phi_0(\mathbf{r}, E', t) + \int dE' \Sigma(E') P_0(E' \rightarrow E' - E) \times \\ \times \Phi_0(\mathbf{r}, E', t) + N_0 \delta(\mathbf{r}) \delta(t) \delta(E - E_0). \end{aligned} \quad (14)$$

3. РЕШЕНИЕ КИНЕТИЧЕСКОГО УРАВНЕНИЯ

Рассматривая сферически-симметричное рассеяние в системе центра масс и используя (3), уравнение (14) можно привести к следующему виду:

$$\begin{aligned} \frac{1}{v\Sigma} \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, E, t) - \frac{1}{3\Sigma\Sigma_{tr}} \Delta \Psi(\mathbf{r}, E, t) + \Psi(\mathbf{r}, E, t) = \\ = 2 \int_E^{E_0} \frac{dE'}{E'} \Psi(\mathbf{r}, E', t) + N_0 \delta(\mathbf{r}) \delta(t) \delta(E - E_0), \end{aligned} \quad (15)$$

где $\Psi(\mathbf{r}, E, t) = \Sigma \Phi_0(\mathbf{r}, E, t)$ — плотность соударений.

Применяя к уравнению (15) преобразование Лапласа по времени и преобразование Фурье по пространственным координатам,

$$\begin{aligned} \tilde{\Psi}(p, \mathbf{k}, E) = \int_0^\infty dt e^{-pt} \iiint_{-\infty}^\infty dx dy dz \times \\ \times \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \Psi(\mathbf{r}, E, t), \end{aligned} \quad (16)$$

получим

$$\begin{aligned} \left(\frac{p}{v\Sigma} + \frac{k^2}{3\Sigma\Sigma_{tr}} + 1 \right) \tilde{\Psi}(p, \mathbf{k}, E) = \\ = 2 \int_E^{E_0} \frac{dE'}{E'} \tilde{\Psi}(p, \mathbf{k}, E') + N_0 \delta(E - E_0). \end{aligned} \quad (17)$$

Выделим из уравнения (17) член, описывающий нерассеянное излучение:

$$\tilde{\Psi}(p, \mathbf{k}, E) = \tilde{\Psi}_0(p, \mathbf{k}, E) + \frac{N_0 \delta(E - E_0)}{\frac{p}{v_0\Sigma} + \frac{k^2}{3\Sigma\Sigma_{tr}} + 1}. \quad (18)$$

Подставив (18) в (17), найдем

$$\begin{aligned} \left(\frac{p}{v\Sigma} + \frac{k^2}{3\Sigma\Sigma_{tr}} + 1 \right) \tilde{\Psi}_0(p, \mathbf{k}, E) = \\ = \frac{2N_0}{E_0 \left(\frac{p}{v_0\Sigma} + \frac{k^2}{3\Sigma\Sigma_{tr}} + 1 \right)} + \\ + 2 \int_E^{E_0} \frac{dE'}{E'} \tilde{\Psi}_0(p, \mathbf{k}, E'). \end{aligned} \quad (19)$$

Учитывая, что сечение рассеяния постоянно ($\Sigma(E) = \text{const}$), и дифференцируя уравнение (19) по энергии, получим дифференциальное уравнение для функции $\tilde{\Psi}_0(p, \mathbf{k}, E)$:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dE} \tilde{\Psi}_0(p, \mathbf{k}, E) = \\ = - \frac{2 - \frac{p}{2v\Sigma}}{E \left(\frac{p}{v\Sigma} + \frac{k^2}{3\Sigma\Sigma_{tr}} + 1 \right)} \tilde{\Psi}_0(p, \mathbf{k}, E). \end{aligned} \quad (20)$$

Решение этого уравнения должно (см. (19)) удовлетворять следующему «начальному» условию:

$$\tilde{\Psi}_0(p, \mathbf{k}, E_0) = \frac{2N_0}{E_0 \left(\frac{p}{v_0\Sigma} + \frac{k^2}{3\Sigma\Sigma_{tr}} + 1 \right)^2}. \quad (21)$$

Решение уравнения (20) с учетом начального условия (21) имеет следующий вид:

$$\tilde{\Psi}_0(p, \mathbf{k}, E) = \frac{2N_0}{E_0} \Sigma^2 v_0 v \frac{\left[p + v_0 \Sigma \left(1 + \frac{k^2}{3\Sigma\Sigma_{tr}} \right) \right]^{(3 - \frac{k^2}{3\Sigma\Sigma_{tr}}) / (1 + \frac{k^2}{3\Sigma\Sigma_{tr}})}}{\left[p + v \Sigma \left(1 + \frac{k^2}{3\Sigma\Sigma_{tr}} \right) \right]^{(5 - \frac{k^2}{3\Sigma\Sigma_{tr}}) / (1 + \frac{k^2}{3\Sigma\Sigma_{tr}})}}. \quad (22)$$

Отсюда найдем функцию распределения $\tilde{f}(p, \mathbf{k}, t)$:

$$\tilde{f}(p, \mathbf{k}, E) = \frac{2N_0}{E_0} \Sigma v_0 \frac{\left[p + v_0 \Sigma \left(1 + \frac{k^2}{3\Sigma\Sigma_{tr}} \right) \right]^{\left(3 - \frac{k^2}{3\Sigma\Sigma_{tr}} \right) / \left(1 + \frac{k^2}{3\Sigma\Sigma_{tr}} \right)}}{\left[p + v \Sigma \left(1 + \frac{k^2}{3\Sigma\Sigma_{tr}} \right) \right]^{\left(5 - \frac{k^2}{3\Sigma\Sigma_{tr}} \right) / \left(1 + \frac{k^2}{3\Sigma\Sigma_{tr}} \right)}} + \frac{N_0 \delta(E - E_0)}{p + v_0 \Sigma \left(1 + \frac{k^2}{3\Sigma\Sigma_{tr}} \right)}, \quad (23)$$

где $\tilde{f} = \tilde{\Psi}/v\Sigma$.

4. АНАЛИЗ ПОЛУЧЕННОГО РЕШЕНИЯ

В случае стационарного, равномерно распределенного в пространстве монохроматического источника положим в выражении (23) $p = k = 0$ и найдем стационарное распределение атомов с учетом их размножения (без учета нерассеянного излучения):

$$\Psi(E) = v\Sigma f(E) = \frac{2N_0}{E_0} \left(\frac{E_0}{E} \right)^2, \quad (24)$$

что совпадает с аналогичным результатом работы [7].

Проанализируем законы сохранения. Найдем изменение со временем полного числа движущихся атомов:

$$N(t) = \iiint_{-\infty}^{\infty} dx dy dz \int_0^{E_0} dE f(\mathbf{r}, E, t). \quad (25)$$

Для этого получим сначала с помощью соотношения (23) образ Лапласа искомой функции:

$$\begin{aligned} \tilde{N}(p) &= \int_0^{E_0} dE \tilde{f}(E, p, \mathbf{k} = 0) = \\ &= N_0 \left(\frac{1}{p} + \frac{v_0 \Sigma}{p^2} + \frac{v_0^2 \Sigma^2}{3p^3} \right). \end{aligned} \quad (26)$$

Применяя к (26) обратное преобразование Лапласа [15], получим, как и следовало ожидать, что число движущихся атомов в каскаде со временем возрастает:

$$N(t) = N_0 \left(1 + \tau + \frac{1}{6} \tau^2 \right), \quad (27)$$

где $\tau = v_0 \Sigma t$ — безразмерное время. В данном случае этот рост будет продолжаться неограниченно, поскольку мы не учитываем энергию связи атомов в твердом теле.

Теперь найдем изменение со временем полной энергии движущихся атомов:

$$E(t) = \iiint_{-\infty}^{\infty} dx dy dz \int_0^{E_0} dE E f(\mathbf{r}, E, t). \quad (28)$$

Воспользовавшись, как и прежде, выражением (23) получим

$$\tilde{E}(p) = \int_0^{E_0} dE \tilde{f}(E, p, \mathbf{k} = 0) = \frac{1}{p} N_0 E_0, \quad (29)$$

откуда вытекает, что полная энергия движущихся атомов со временем не изменяется и равна начальной:

$$E(t) = N_0 E_0 = \text{const}. \quad (30)$$

Из соотношения (30) следует, что, несмотря на рост числа движущихся атомов, их полная энергия со временем сохраняется. Это объясняется тем, что мы не учитываем энергию связи покоящихся атомов. В таком случае энергия, с которой начал двигаться после соударения покоящийся атом, целиком равна энергии, переданной ему движущимся атомом.

Из полученных соотношений (27) и (30) проведем оценку промежутка времени, в течение которого результат (23) будет справедлив без учета энергии связи атомов в твердом теле (ε_d). Поскольку на создание одного выбитого атома тратится энергия ε_d , с ростом времени затраченная на выбивание атомов энергия E_d возрастает (см. (27)):

$$E_d \approx \frac{1}{6} N_0 \tau^2 \varepsilon_d. \quad (31)$$

В таком случае результат (23) будет справедлив и при учете энергии связи до тех пор, пока величина (31) будет значительно меньше величины (30), т. е. при временах (см. также [13])

$$\tau \ll \sqrt{\frac{6E_0}{\varepsilon_d}}. \quad (32)$$

Положив в (23) $k = 0$ и применив далее к полученному выражению обратное преобразование Лапласа, найдем нестационарное энергетическое распределение каскада атомных столкновений в случае равномерно распределенного в пространстве источника в универсальном безразмерном виде:

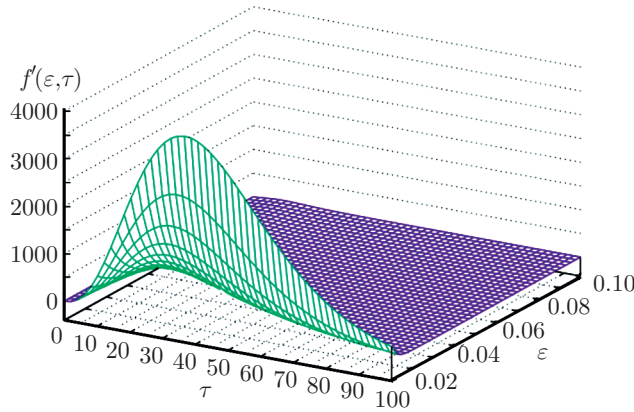


Рис. 1. Функция распределения замедляющихся атомов от однородно распределенного в пространстве источника с учетом их размножения (в пределах $0 \leq \tau \leq 100$, $0.01 \leq \epsilon \leq 0.1$)

$$f(E, t) = 2\tau \left\{ 1 + \frac{3}{2} [(1 - \sqrt{\epsilon}) \tau] + \frac{1}{2} [(1 - \sqrt{\epsilon}) \tau]^2 + \frac{1}{24} [(1 - \sqrt{\epsilon}) \tau]^3 \right\} e^{-\tau\sqrt{\epsilon}} + \frac{N_0}{E_0} e^{-\tau} \delta(\epsilon - 1), \quad (33)$$

где $\epsilon = E/E_0$ — безразмерная энергия, $f' = fE_0/N_0$. Это выражение совпадает с точным решением, полученным ранее в работе [13], где были проведены его подробный анализ и сопоставление с результатом, не учитывающим процесс размножения замедляющихся атомов. На рис. 1 представлена функция (33) при $E < E_0$ (рассеянное излучение).

5. НЕСТАЦИОНАРНОЕ ПРОСТРАНСТВЕННО-ЭНЕРГЕТИЧЕСКОЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЕ КАСКАДА ЗАМЕДЛЯЮЩИХСЯ АТОМОВ

Применяя к первому слагаемому в выражении (23), описывающему рассеянное излучение, обратное преобразование Лапласа по времени, получим [15]

$$\tilde{f}(E, t, \mathbf{k}) = \frac{2N_0}{E_0} v_0 \Sigma t \exp \left[-v_0 \Sigma t \left(1 + \frac{k^2}{3\Sigma\Sigma_{tr}} \right) \right] \times F_1 \left[\frac{5 + \frac{k^2}{3\Sigma\Sigma_{tr}}}{1 + \frac{k^2}{3\Sigma\Sigma_{tr}}}; 2; (v_0 - v) \Sigma t \left(1 + \frac{k^2}{3\Sigma\Sigma_{tr}} \right) \right], \quad (34)$$

где $F_1(\alpha; \gamma; z)$ — вырожденная гипергеометрическая функция [16].

При использовании обратного преобразования Фурье будем предполагать, что основной вклад в интеграл дают малые значения k^2 ($k^2 < 3\Sigma\Sigma_{tr}$) [14]. Далее, рассматривая случай $v \ll v_0$ и полагая $v_0 \Sigma t \gg 1$, воспользуемся асимптотическим представлением гипергеометрической функции [16]:

$$F_1(\alpha; \gamma; z) \approx \frac{\Gamma(\gamma)}{\Gamma(\alpha)} z^{\alpha-\gamma} e^z, \quad (35)$$

где $\Gamma(x)$ — гамма-функция [16].

Учитывая сказанное выше и воспользовавшись выражением (35), найдем

$$F_1 \left[\left(\frac{5 + \frac{k^2}{3\Sigma\Sigma_{tr}}}{1 + \frac{k^2}{3\Sigma\Sigma_{tr}}} \right); 2; (v_0 - v) \Sigma t \left(1 + \frac{k^2}{3\Sigma\Sigma_{tr}} \right) \right] \approx (v_0 \Sigma t)^3 \left(1 - \frac{4}{3} \frac{k^2}{3\Sigma\Sigma_{tr}} \right) \left(1 + 3 \frac{k^2}{3\Sigma\Sigma_{tr}} \right) \times \exp \left[(v_0 - v) \Sigma t \left(1 + \frac{k^2}{3\Sigma\Sigma_{tr}} \right) \right], \quad (36)$$

поскольку

$$\Gamma \left(\frac{5 + \frac{k^2}{3\Sigma\Sigma_{tr}}}{1 + \frac{k^2}{3\Sigma\Sigma_{tr}}} \right) \approx \Gamma \left[5 \left(1 - \frac{4}{5} \frac{k^2}{3\Sigma\Sigma_{tr}} \right) \right] \approx \Gamma(5),$$

$$\left[(v_0 - v) \Sigma t \left(1 + \frac{k^2}{3\Sigma\Sigma_{tr}} \right) \right]^{3 \left(1 - \frac{4}{3} \frac{k^2}{3\Sigma\Sigma_{tr}} \right)} \approx (v_0 \Sigma t)^3 \left(1 - \frac{4}{3} \frac{k^2}{3\Sigma\Sigma_{tr}} \right) \left(1 + 3 \frac{k^2}{3\Sigma\Sigma_{tr}} \right).$$

Подставив соотношение (36) в (34), получим

$$\tilde{f}(E, t, \mathbf{k}) = \frac{2N_0}{E_0} \frac{1}{24} \tau^4 \exp(-\tau\sqrt{\epsilon}) \times \left(1 + 3 \frac{k^2}{3\Sigma\Sigma_{tr}} \right) \exp \left[-\frac{k^2}{3\Sigma\Sigma_{tr}} (\tau\sqrt{\epsilon} + 4 \ln \tau) \right]. \quad (37)$$

При $k = 0$ выражение (37) совпадает с асимптотикой ($\tau \gg 1$, $\epsilon \ll 1$) нестационарного энергетического распределения каскада атомных столкновений от однородно распределенного в пространстве источника (см. (33)).

Применяя к (37) обратное преобразование Фурье, получим окончательное выражение для нестационарного распределения

ционарного пространственно-энергетического распределения каскада движущихся атомов:

$$f(E, \mathbf{r}, t) = \frac{2N_0}{E_0} \frac{1}{24} \tau^4 \exp(-\tau\sqrt{\varepsilon}) \times \left\{ 1 + \frac{9}{2} \frac{1}{\xi(E, t)} \left[1 - \frac{r^2}{6 \frac{\xi(E, t)}{3\Sigma_{tr}}} \right] \right\} \times \frac{\exp\left(-\frac{r^2}{4\xi(E, t)/3\Sigma_{tr}}\right)}{\left(\frac{4\pi\xi(E, t)}{3\Sigma_{tr}}\right)^{3/2}}, \quad (38)$$

где $\xi(E, t) = \tau\sqrt{\varepsilon} + 4 \ln \tau$.

Функцию (38) можно представить в универсальном безразмерном виде:

$$f'(\varepsilon, \rho, \tau) = \frac{1}{12} \tau^4 \exp(-\tau\sqrt{\varepsilon}) \times \left\{ 1 + \frac{9}{2\xi(\varepsilon, \tau)} \left[1 - \frac{\rho^2}{6\xi(\varepsilon, \tau)} \right] \right\} \times \frac{\exp[-\rho^2/4\xi(\varepsilon, \tau)]}{[4\pi\xi(\varepsilon, \tau)]^{3/2}}, \quad (39)$$

где

$$f' = f \frac{E_0}{N_0} \left(\frac{1}{3\Sigma_{tr}} \right)^{3/2}, \quad \xi(\varepsilon, \tau) = \tau\sqrt{\varepsilon} + 4 \ln \tau, \\ \rho = r\sqrt{3\Sigma_{tr}}.$$

Проделав вычисления, аналогичные проведенным выше, для нестационарного пространственно-энергетического распределения замедляющихся атомов без учета их размножения (второй интеграл в уравнении (1) равен нулю), получим следующий результат (см. также [14]):

$$f'_n(\varepsilon, \rho, \tau) = \frac{1}{2} \tau^2 \exp(-\tau\sqrt{\varepsilon}) \times \left\{ 1 + \frac{3}{2\xi_0(\varepsilon, \tau)} \left[1 - \frac{\rho^2}{6\xi_0(\varepsilon, \tau)} \right] \right\} \times \frac{\exp[-\rho^2/4\xi_0(\varepsilon, \tau)]}{[4\pi\xi_0(\varepsilon, \tau)]^{3/2}}, \quad (40)$$

где $\xi_0(\varepsilon, \tau) = \tau\sqrt{\varepsilon} + 2 \ln \tau$.

Следует отметить, что оба результата, (39) и (40), представляют собой произведение нестационарной функции распределения в среде с равномерно распределенным по пространству источником и нормированного на единицу множителя, учитывающего пространственную зависимость.

6. АНАЛИЗ ПРОСТРАНСТВЕННОГО РАСПРЕДЕЛЕНИЯ КАСКАДА ЗАМЕДЛЯЮЩИХСЯ АТОМОВ

Проанализируем нестационарное пространственно-энергетическое распределение каскада замедляющихся атомов (39). Исходя из сделанных предположений это выражение будет справедливо и при учете энергии связи атомов в узлах решетки, если $\varepsilon \ll 1$ в моменты времени, лежащие в интервале (см. (32))

$$1 \ll \tau \ll \sqrt{6E_0/\varepsilon_d}. \quad (41)$$

На рис. 2а представлены пространственные распределения атомов (39) в момент времени $\tau = 10$ при различных значениях энергии. Из этих результатов следует, что в фиксированный момент времени с уменьшением энергии число атомов в каскаде увеличивается. Это происходит как за счет замедления, так и за счет размножения. Для сравнения на рис. 2б представлены аналогичные результаты без учета размножения замедляющихся атомов (см. (40)). В данном случае рост функции обусловлен тем, что за счет замедления увеличивается число атомов с меньшими энергиями. Сами значения функции меньше аналогичных на рис. 2а, поскольку размножение атомов здесь не учитывается.

На рис. 3а представлены пространственные распределения атомов (39) при фиксированном значении энергии в различные моменты времени. Эти результаты показывают, что число атомов с данной энергией со временем уменьшается за счет замедления. Без учета размножения (см. (40)) наблюдается аналогичная тенденция при значительно меньших значениях самой функции распределения (рис. 3б).

Следует отметить, что результаты, приведенные на рис. 2, 3, правильно описывают функцию распределения и при учете энергии связи атомов в узлах решетки, так как соответствующие им значения энергии и времени удовлетворяют условию применимости (41), сформулированному выше. Действительно, при $E_0 \approx 1$ МэВ и $\varepsilon_d \approx 15$ эВ имеем $\sqrt{6E_0/\varepsilon_d} \approx 6 \cdot 10^2$.

7. ВЫВОДЫ

На основе решения кинетического уравнения Больцмана получена функция распределения, описывающая нестационарное пространственно-энергетическое распределение каскада замедляющихся атомов с учетом их размножения (см. (38), (39)). При решении предполагалось, что рассеяние движу-

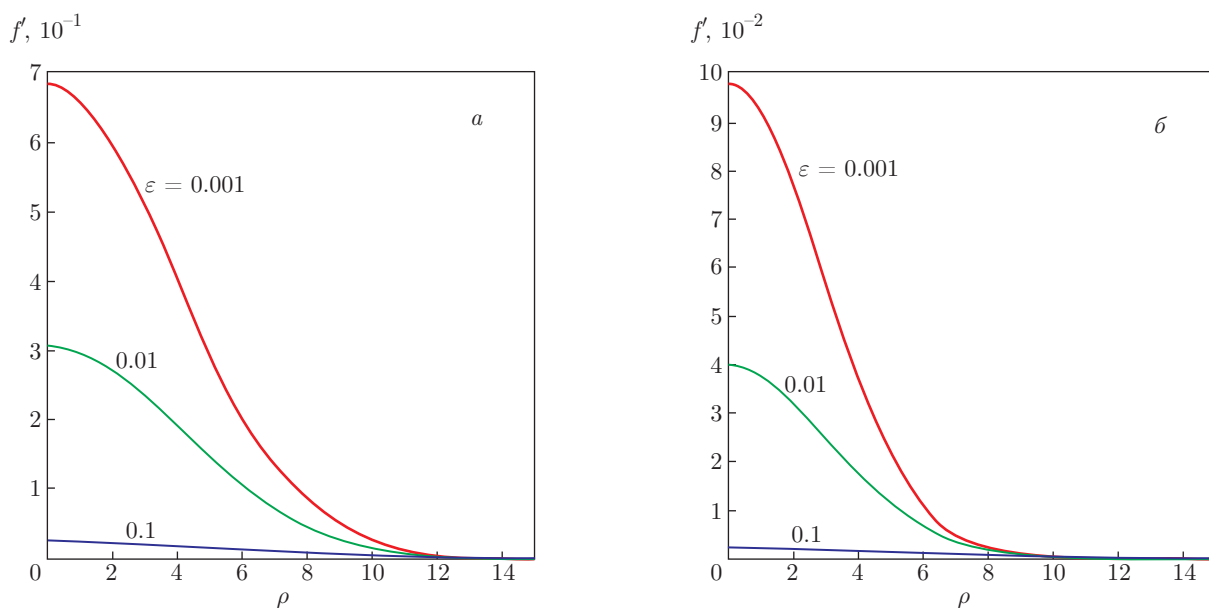


Рис. 2. Пространственные распределения атомов в момент времени $\tau = 10$ при энергиях $\epsilon = 0.1, 0.01, 0.001$ с учетом (а) и без учета (б) их размножения

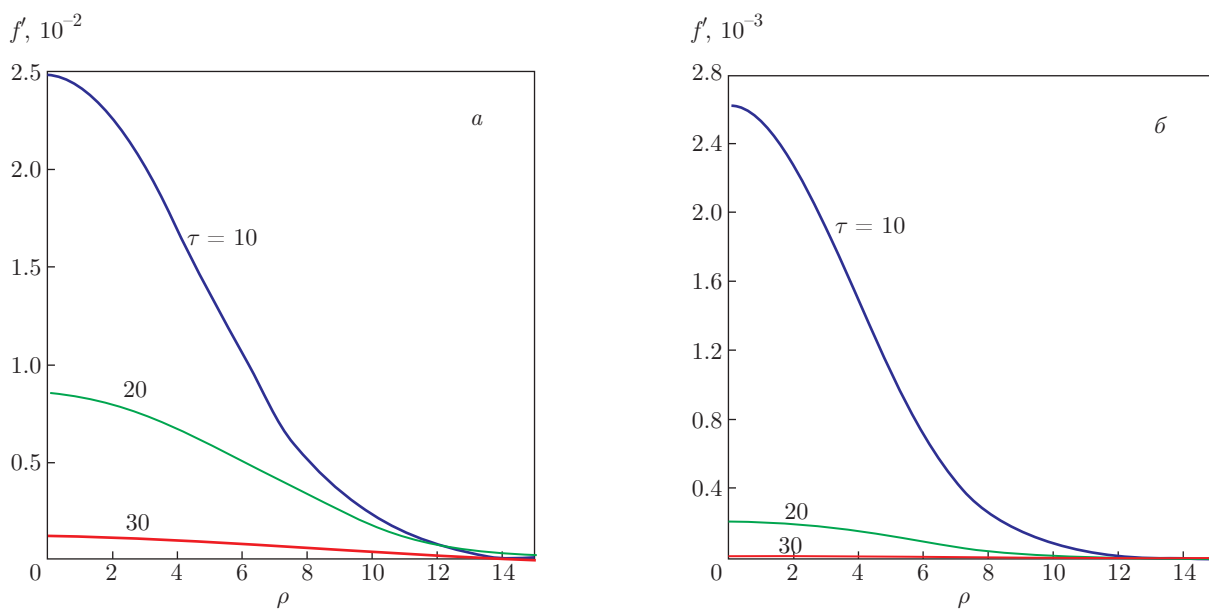


Рис. 3. Пространственные распределения атомов при энергии $\epsilon = 0.1$ в моменты времени $\tau = 10, 20, 30$ с учетом (а) и без учета (б) их размножения

щихся атомов является упругим и сферически-симметричным в системе центра инерции, а сечение взаимодействия является постоянной величиной. Кроме того, предполагалось, что твердое тело состоит из атомов одного сорта, энергия связи которых не учи-

тывалась. На основе законов сохранения был сформулирован критерий (41), указывающий, при каких временах и энергиях этот результат будет справедлив и при учете энергии связи атомов в узлах решетки.

Проанализированы особенности, присущие функции распределения, имеющие общий характер. Кроме того, проведено сопоставление этой функции распределения с аналогичным результатом (40), не учитывающим размножение атомов, и отмечены их характерные различия, обусловленные ростом числа атомов в каскаде за счет размножения. Следует отметить, что на основе полученных результатов можно оценивать точность различных приближенных решений.

ЛИТЕРАТУРА

1. К. Лейман, *Взаимодействие излучения с твердым телом и образование элементарных дефектов*, Атомиздат, Москва (1979).
2. С. Вас Гэри, *Основы радиационного материаловедения. Металлы и сплавы*, Техносфера, Москва (2014).
3. A. I. Ryazanov and E. V. Metelkin, *Radiat. Effects and Defects in Solids* **52**, 15 (1980).
4. Y. Sato, S. Kojimo, T. Yoshiie et al., *J. Nucl. Mater.* **179–181**, 901 (1991).
5. Y. Sato, T. Yoshiie, and M. Kiritani, *J. Nucl. Mater.* **191–194**, 1101 (1992).
6. Е. В. Метелкин, А. И. Рязанов, *Атомная энергия* **83**, 183 (1997).
7. Е. В. Метелкин, А. И. Рязанов, Е. В. Семенов, *ЖЭТФ* **134**, 469 (2008).
8. A. I. Ryazanov, E. V. Metelkin, and E. V. Semenov, *J. Nucl. Mater.* **386–388**, 132 (2009).
9. А. А. Александров, В. А. Акатьев, Е. В. Метелкин и др., *Вестник МГТУ им. Н. Э. Баумана, сер. Естественные науки* **1**, 27 (2019).
10. J. Lindhard, V. Nielsen, and M. Scharff, *Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk.* **36**, 1 (1968).
11. В. А. Акатьев, Е. В. Метелкин, А. М. Савинов, *Атомная энергия* **122**, 295 (2017).
12. Е. В. Метелкин, М. В. Лебедева, А. В. Черняев, *Атомная энергия* **125**, 184 (2018).
13. А. А. Александров, В. А. Акатьев, Е. В. Метелкин и др., *Вестник МГТУ им. Н. Э. Баумана, сер. Естественные науки* (2019), в печати.
14. А. И. Исаков, М. В. Казарновский, Ю. А. Медведев, и др., *Нестационарное замедление нейтронов. Основные закономерности и некоторые приложения*, Наука, Москва (1984).
15. Г. Бейтман, А. Эрдейи, *Таблицы интегральных преобразований*, т. 1, Наука, Москва (1969).
16. И. С. Градштейн, И. М. Рыжик, *Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений*, Наука, Москва (1971).