

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ КИНЕТИЧЕСКОГО УРАВНЕНИЯ БОЛЬЦМАНА ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ РАЗМНОЖЕНИЯ БЫСТРЫХ ЭЛЕКТРОНОВ В ОБЛУЧАЕМЫХ МАТЕРИАЛАХ

A. I. Рязанов, Т. И. Могилюк, Е. В. Семенов*

*Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»
123182, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 18 июля 2011 г.

Рассмотрены процессы формирования каскадов электронных столкновений, созданных быстрыми нерелятивистскими электронами, которые могут образовываться в материалах в результате облучения их потоками электронов и гамма-квантов. Решение данной задачи основывается на использовании кинетического уравнения Больцмана для движущихся быстрых электронов. Для этого уравнения построена модельная индикатриса рассеяния при произвольном потенциале взаимодействия движущихся частиц. С помощью построенной модельной индикатрисы рассеяния получено энергетическое распределение движущихся частиц. На основе вычисленного энергетического распределения быстрых движущихся частиц для произвольных потенциалов межчастичного взаимодействия находится каскадная функция, описывающая размножение выбитых электронов (электронный каскад), которые образуются при рассеянии быстрого электрона с некоторой кинетической энергией на электронной подсистеме облучаемого материала. Расчеты каскадной функции проведены с использованием кулоновского потенциала взаимодействия между быстрым электроном и атомарными электронами.

1. ВВЕДЕНИЕ

В данной работе использованы аналитический и статистический методы для исследования размножения быстрых частиц в облучаемом материале, которые позволяют рассчитать образование каскадов электронных столкновений с двухчастичным межэлектронным взаимодействием при облучении материалов потоками быстрых электронов. Каскады электронных столкновений также могут возникать в результате образования вторичных электронов, образующихся при некогерентном взаимодействии гамма-квантов с веществом под действием фотoeffекта, комптоновского эффекта, или рождения электрон-позитронных пар, либо при облучении материалов тяжелыми ионами, когда вдоль трека зараженной частицы в радиальном направлении образуются быстрые δ -электроны [1, 2].

Рассмотрим общую задачу, в которой необходимо найти полное число возбужденных произвольных частиц (атомов, нейтронов, электронов), энергия связи которых равна I .

Для описания каскада столкновений быстрых частиц введем энергетическую функцию распределения для движущихся частиц $f(\varepsilon, t)$ с энергией ε в момент времени t , подчиняющуюся кинетическому уравнению Больцмана:

$$\begin{aligned} \frac{1}{v} \frac{\partial \phi(\varepsilon, t)}{\partial t} + \Sigma(\varepsilon) \phi(\varepsilon, t) = \\ = \int_{\varepsilon}^{\infty} \Sigma(\varepsilon') P(\varepsilon' \rightarrow \varepsilon) \phi(\varepsilon', t) d\varepsilon' + \\ + \int_{\varepsilon+I}^{\infty} \Sigma(\varepsilon') P(\varepsilon' \rightarrow \varepsilon' - \varepsilon - I) \phi(\varepsilon', t) d\varepsilon' + \\ + \delta(t) \delta(\varepsilon - \varepsilon_0), \quad (1) \end{aligned}$$

$\phi(\varepsilon, t) = v f(\varepsilon, t)$; v — скорость движущихся частиц; $\Sigma(\varepsilon) = N \sigma(\varepsilon)$; $\sigma(\varepsilon)$ — сечение рассеяния частицы с энергией ε на другой частице; N — плотность частиц в веществе; $P(\varepsilon' \rightarrow \varepsilon)$ — вероятность того, что движущаяся частица после столкновения с другой будет иметь энергию в интервале $\varepsilon, \varepsilon + d\varepsilon$; и $\delta(t) \delta(\varepsilon - \varepsilon_0)$ — функция, описывающая моноэнергети-

*E-mail: ryazanoff@comail.ru

тический источник быстрых частиц (δ -дельта-функция Дирака).

Уравнение (1) представляет собой линейное уравнение Больцмана, описывающее распределение по энергии замедляющихся частиц с учетом их размножения (второй член в правой части), возникающего вследствие возбуждения частиц при передачи им некоторой кинетической энергии.

В данной работе мы ограничимся рассмотрением стационарных решений. Стоит заметить, что нестационарное кинетическое уравнение может быть сведено к стационарному с помощью преобразования Лапласа по времени.

Перед переходом к решению этого уравнения рассмотрим более простой случай: найдем функцию распределения по энергии замедляющихся частиц без учета их размножения.

2. ЭНЕРГЕТИЧЕСКОЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ЗАМЕДЛЯЮЩИХСЯ ЧАСТИЦ БЕЗ УЧЕТА ИХ РАЗМНОЖЕНИЯ

Распределение по энергии замедляющихся частиц без учета их размножения описывается уравнением, которое проще уравнения (1) и широко используется в линейной теории переноса быстрых частиц [3]:

$$[\Sigma_a(\varepsilon) + \Sigma_s(\varepsilon)]\phi(\varepsilon) = \int_0^\infty d\varepsilon' \Sigma_s(\varepsilon') P(\varepsilon' \rightarrow \varepsilon) \phi(\varepsilon') + \delta(\varepsilon - \varepsilon_0), \quad (2)$$

где Σ_s , Σ_a — макроскопическое сечение рассеяния и поглощения замедляющихся частиц мишениами.

Решение уравнения (2) с произвольной формой сечений рассеяния Σ_a , Σ_s , $P(\varepsilon' \rightarrow \varepsilon)$ представляет собой сложную математическую задачу.

Точное решение уравнения (2) было получено в теории замедления быстрых нейтронов для ряда отдельных случаев при упругом сферически-симметричном рассеянии. В добавок к этому, для уравнения (2) был разработан ряд приближенных методов решения, которые могут быть разбиты на две группы. Первая группа включает методы решения, основанные на непрерывной теории замедления с малыми энергетическими потерями в одном столкновении (приближение возраста). Среди методов второй группы имеются такие, которые основаны на построении индикаторы рассеяния [4], т. е. на представлении функции $P(\varepsilon' \rightarrow \varepsilon)$ в специальной форме, чтобы, с одной стороны, принять во внимание свойства

реальнойной индикаторы, а с другой — упростить решение уравнения (2).

Поскольку при торможении быстрых движущихся частиц энергетические потери при единичном столкновении могут оказаться значительными, для решения уравнения (2) используем метод, основанный на построении модельной индикаторы. Для этой цели воспользуемся функцией $\tilde{P}(\varepsilon' \rightarrow \varepsilon)$, которая удовлетворяет следующим свойствам:

$$\int_0^{\varepsilon'} d\varepsilon \tilde{P}(\varepsilon' \rightarrow \varepsilon) = \int_0^{\varepsilon'} d\varepsilon P(\varepsilon' \rightarrow \varepsilon) = 1, \quad (3)$$

$$\begin{aligned} \int_0^{\varepsilon'} d\varepsilon (\varepsilon' - \varepsilon) \tilde{P}(\varepsilon' \rightarrow \varepsilon) &= \\ &= \int_0^{\varepsilon'} d\varepsilon (\varepsilon' - \varepsilon) P(\varepsilon' \rightarrow \varepsilon) = \Delta(\varepsilon'), \end{aligned} \quad (4)$$

$$\begin{aligned} \int_0^{\varepsilon'} d\varepsilon (\varepsilon' - \varepsilon)^2 \tilde{P}(\varepsilon' \rightarrow \varepsilon) &= \\ &= \int_0^{\varepsilon'} d\varepsilon (\varepsilon' - \varepsilon)^2 P(\varepsilon' \rightarrow \varepsilon) = \Omega^2(\varepsilon'). \end{aligned} \quad (5)$$

Условие (3) представляет собой обычное условие нормировки. Согласно условиям (4) и (5) индикатора рассеяния дает верные значения энергетических потерь в отдельном столкновении $\Delta(\varepsilon)$ и для величины $\Omega^2(\varepsilon)$, определяющей возможные отклонения от среднего значения реально происходящих энергетических потерь. Существует большое число функций, удовлетворяющих данным условиям (3)–(5). С помощью результата, приведенного в работе [4], для функции $\tilde{P}(\varepsilon' \rightarrow \varepsilon)$ получим следующее выражение:

$$\begin{aligned} \tilde{P}(\varepsilon' \rightarrow \varepsilon) &= \frac{d}{d\varepsilon} \left\{ \frac{\Delta(\varepsilon')\gamma(\varepsilon')}{\gamma^2(\varepsilon)} \left(1 - \frac{d\gamma}{d\varepsilon} \right) \times \right. \\ &\times \exp \left(- \int_{\varepsilon}^{\varepsilon'} \frac{d\omega}{\gamma(\omega)} \right) \left. \right\} + \left[1 - \frac{\Delta(\varepsilon)}{\gamma(\varepsilon)} \left(1 - \frac{d\gamma}{d\varepsilon} \right) \right] \times \\ &\times \delta(\varepsilon - \varepsilon'), \end{aligned} \quad (6)$$

где

$$\gamma(\varepsilon) = \frac{\Omega^2(\varepsilon)}{2\Delta(\varepsilon)}. \quad (7)$$

В случае упругого рассеяния частиц равной массы, которое сферически-симметрично в системе отсчета, связанной с центром масс, выражения для этих функций имеют следующий вид:

$$\Delta(\varepsilon) = \frac{1}{2}\varepsilon, \quad \Omega^2(\varepsilon) = \frac{1}{3}\varepsilon^2. \quad (8)$$

Подстановка (8) в уравнение (6) приводит к следующему соотношению:

$$\tilde{P}(\varepsilon' \rightarrow \varepsilon) = \frac{1}{\varepsilon'} \theta(\varepsilon' - \varepsilon). \quad (9)$$

Полученное выражение (9) совпадает с точным выражением для соответствующей индикатрисы рассеяния.

Перейдем к решению уравнения (2). Подставляя уравнение (6) в интеграл уравнения (2) и дифференцируя его по энергии, получим уравнение первого порядка, решение которого для граничного условия $\phi(\infty) = 0$ принимает следующий вид:

$$\begin{aligned} \phi(\varepsilon) &= \frac{\gamma(\varepsilon)\beta(\varepsilon)\delta(\varepsilon - \varepsilon_0)}{\kappa(\varepsilon)\Sigma_{eff}(\varepsilon)} + \frac{\Sigma_s(\varepsilon_0)}{\Sigma_{eff}(\varepsilon_0)} \times \\ &\times \frac{1}{\kappa(\varepsilon)\Sigma_{eff}(\varepsilon)} \exp \left\{ - \int_{\varepsilon}^{\varepsilon_0} \frac{d\varepsilon' \Sigma_a(\varepsilon')}{\kappa(\varepsilon')\Sigma_{eff}(\varepsilon')} \right\}, \end{aligned} \quad (10)$$

где

$$\Sigma_{eff}(\varepsilon) = \Sigma_s(\varepsilon) + \Sigma_a(\varepsilon) \frac{\gamma(\varepsilon)\beta(\varepsilon)}{\kappa(\varepsilon)}, \quad (11)$$

$$\kappa(\varepsilon) = \Delta(\varepsilon)\beta(\varepsilon) \left(1 - \frac{d\gamma}{d\varepsilon} \right), \quad (12)$$

$$\begin{aligned} \beta(\varepsilon) &= \left(1 - \frac{d\gamma}{d\varepsilon} \right) \left[\left(1 - \frac{d\gamma}{d\varepsilon} \right) \times \right. \\ &\times \left. \left(1 - 2 \frac{d\gamma}{d\varepsilon} \right) - \gamma \frac{d^2\gamma}{d\varepsilon^2} \right]^{-1}. \end{aligned} \quad (13)$$

Решение (10) уравнения (2) с учетом процесса замедления частиц было получено для произвольной зависимости от энергии функций $\Delta(\varepsilon)$ и $\Omega^2(\varepsilon)$ при использовании соотношений для первых двух моментов индикатрисы рассеяния (см. уравнения (3)–(5)). Для оценки точности приближенного выражения (10) сравним результаты, полученные на его основе, с доступным точным решением уравнения (2). В случае упругого сферически-симметричного в системе центра масс рассеяния частицы массы m_1 на частице массы m_2 для функций $\Delta(\varepsilon)$ и $\Omega^2(\varepsilon)$ имеем следующие соотношения [5]:

$$\begin{aligned} \Delta(\varepsilon) &= \frac{\alpha}{2}\varepsilon, \quad \gamma(\varepsilon) = \frac{\alpha\varepsilon}{3}, \quad \alpha = \frac{4M}{(M+1)^2}, \\ M &= \frac{m_2}{m_1}. \end{aligned} \quad (14)$$

Когда массы сталкивающихся частиц совпадают ($\alpha = 1$), выражение (11) совпадает с соответствующим точным решением уравнения (2) (см. работу [3]). В отсутствие поглощения ($\Sigma_a = 0$) функция распределения принимает вид (при $\varepsilon < \varepsilon_0$)

$$\Psi(\varepsilon) = \varepsilon\Sigma(\varepsilon)\phi(\varepsilon) = \frac{2(3-2\alpha)}{\alpha(3-\alpha)}. \quad (15)$$

Точное решение уравнения (3) в этом случае:

$$\Psi_t(\varepsilon) = \varepsilon\Sigma(\varepsilon)\phi(\varepsilon) = \left[1 + \frac{1-\alpha}{\alpha} \ln(1-\alpha) \right]^{-1}. \quad (16)$$

Численные оценки показывают, что при изменении α от нуля до единицы значение отношения $\Psi(\varepsilon)/\Psi_t(\varepsilon)$ (см. уравнения (15), (16)) не отличается от единицы более, чем на 6 %. Таким образом, аналитический подход дает хорошее приближенное решение кинетического уравнения (2) с помощью модельной индикатрисы рассеяния (6).

3. ЭНЕРГЕТИЧЕСКОЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ДВИЖУЩИХСЯ ЧАСТИЦ В КАСКАДЕ МЕЖЧАСТИЧНЫХ СТОЛКНОВЕНИЙ

Обратимся к определению стационарного решения уравнения (1), описывающего энергетическое распределение движущихся частиц в каскаде межчастичных столкновений. Для этого мы упростим уравнение (1) так, чтобы оно имело форму, аналогичную (2), чье решение было найдено (см. (3)), и в то же время привело к законам сохранения числа частиц и рассеянной кинетической энергии в каскаде столкновений, что следует точному уравнению (1). С помощью уравнения (1) найдем необходимые законы сохранения.

Закон сохранения частиц $N(t)$ ($t > 0$), вовлеченных в развитие каскада столкновений, будет получен с помощью интегрирования уравнения (1) по энергии:

$$\frac{\partial N(t)}{\partial t} = \int_I p(\varepsilon') \Sigma(\varepsilon') \phi(\varepsilon') d\varepsilon', \quad (17)$$

где

$$\begin{aligned} N(t) &= \int_0^\infty f(\varepsilon', t) d\varepsilon', \\ p(\varepsilon') &= \int_{\varepsilon'-I}^0 P(\varepsilon' \rightarrow \varepsilon) d\varepsilon. \end{aligned} \quad (18)$$

Величина $p(\varepsilon')$ представляет вероятность того, что движущаяся частица с энергией ε передает связанный частице количество энергии большее чем I при $\varepsilon' \leq I p(\varepsilon') = 0$. Умножая уравнение (1) на ε' и интегрируя его по энергии от нуля до бесконечности, можно получить закон сохранения энергии, рассеянной частицами каскада при столкновениях:

$$\frac{\partial E(t)}{\partial t} = - \int_0^\infty \Delta_0(\varepsilon') \Sigma(\varepsilon') d\varepsilon', \quad (19)$$

где

$$E(t) = \int_0^\infty d\varepsilon' \varepsilon' f(\varepsilon', t), \quad (20)$$

$$\begin{aligned} \Delta_0(\varepsilon') &= \\ &= \begin{cases} \Delta(\varepsilon'), & \varepsilon' \leq I, \\ p(\varepsilon')I + \int_{\varepsilon'-I}^{\varepsilon'} (\varepsilon' - \varepsilon) P(\varepsilon' \rightarrow \varepsilon) d\varepsilon, & \varepsilon' \geq I. \end{cases} \end{aligned} \quad (21)$$

Из соотношений (19)–(21) следует, что энергия рассеивается движущимися частицами так, что при $\varepsilon' < I$ движущаяся частица не может возбудить связанную частицу, но может только передать определенную долю своей энергии. В одном таком столкновении движущаяся частица расходует долю энергии $\Delta(\varepsilon')$, равную потерям средней кинетической энергии в отдельном столкновении. При более высокой энергии ($\varepsilon' > I$) энергетические потери частицы вызваны тем обстоятельством, что движущаяся частица тратит долю энергии ($p(\varepsilon')I$) на возбуждения другой и теряет некоторую долю энергии на столкновение без ее выбивания (меньшую чем I). Все упомянутое выше проявляется в законе сохранения энергии (19).

Теперь, как было указано выше, перепишем уравнение (1) в более простой форме, удобной для дальнейшего решения.

$$\begin{aligned} \frac{1}{v} \frac{\partial \phi}{\partial t} + (\Sigma + \delta\Sigma_1) \phi(\varepsilon) &= \\ &= \int_\varepsilon^\infty (\Sigma + \delta\Sigma_1) P(\varepsilon' \rightarrow \varepsilon) \phi(\varepsilon') d\varepsilon' + \\ &+ \int_{\varepsilon+I}^\infty (\Sigma + \delta\Sigma_2) P(\varepsilon' \rightarrow \varepsilon' - \varepsilon - I) \phi(\varepsilon') d\varepsilon' + \\ &+ \delta(t) \delta(\varepsilon - \varepsilon_0). \end{aligned} \quad (22)$$

Величины $\delta\Sigma_1$ и $\delta\Sigma_2$ можно найти, потребовав, чтобы уравнение (22) приводило к тем же законам сохранения числа частиц и энергии, что и уравнение (1). Путем интегрирования уравнения по энергии мы получим закон сохранения числа движущихся частиц:

$$\frac{\partial N(t)}{\partial t} = \int_0^\infty (\Sigma + \delta\Sigma_2) \phi(\varepsilon') d\varepsilon'. \quad (23)$$

Из условия совпадения законов сохранения числа частиц (17) и (23) можно получить

$$\delta\Sigma_2(\varepsilon') = -\Sigma(\varepsilon') [1 - p(\varepsilon')]. \quad (24)$$

Закон сохранения энергии для уравнения (22) приводит к следующему соотношению:

$$\frac{\partial E(t)}{\partial t} = - \int_0^\infty d\varepsilon' \Delta(\varepsilon') [\delta\Sigma_1 - \delta\Sigma_2] \phi(\varepsilon'). \quad (25)$$

Требование совпадения законов сохранения энергии (19) и (25) приводит к соотношению

$$\delta\Sigma_1(\varepsilon') = \Sigma(\varepsilon') \left[p(\varepsilon') + \frac{\Delta_0(\varepsilon')}{\Delta(\varepsilon')} - 1 \right]. \quad (26)$$

Используя уравнения (24) и (26), уравнение (22) для стационарного случая можно переписать в следующем виде:

$$\begin{aligned} \Sigma \left(p + \frac{\Delta_0}{\Delta} \right) \phi(\varepsilon) &= \int_\varepsilon^\infty \left[p(\varepsilon') + \frac{\Delta_0(\varepsilon')}{\Delta(\varepsilon')} \right] \Sigma(\varepsilon') \times \\ &\times P(\varepsilon' \rightarrow \varepsilon) \phi(\varepsilon') d\varepsilon' + \int_\varepsilon^\infty p(\varepsilon') \Sigma(\varepsilon') \times \\ &\times P(\varepsilon' \rightarrow \varepsilon' - \varepsilon) \phi(\varepsilon') d\varepsilon' + \delta(\varepsilon - \varepsilon_0). \end{aligned} \quad (27)$$

Приближенное уравнение (22) удовлетворяет каждому из законов сохранения (17) и (19), что следует из точного кинетического уравнения (1). В этом случае характер межчастичного взаимодействия считался произвольным. При $\varepsilon \rightarrow I$, $p \rightarrow 0$, $\Delta_0 \rightarrow \Delta$, $\delta\Sigma_2 = 0$ уравнение (27) в области энергии $\varepsilon \geq I$ постепенно переходит в обычное уравнение замедления (см. (2) для $\Sigma_a = 0$). Таким образом, уравнение (27) приближенно описывает энергетическое распределение движущихся частиц по всей области энергии от 0 до ε_0 . Перепишем уравнение (27) в следующей форме:

$$\begin{aligned} \left\{ \left[2p + \frac{\Delta_0}{\Delta} \right] - p\Sigma \right\} \phi &= \int_0^\infty \left(2p + \frac{\Delta_0}{\Delta} \right) \times \\ &\times \Sigma P_{tot}(\varepsilon' \rightarrow \varepsilon) \phi(\varepsilon') d\varepsilon' + \delta(\varepsilon - \varepsilon_0), \end{aligned} \quad (28)$$

где

$$\begin{aligned} P_{tot} = & \frac{p + \Delta_0/\Delta}{2p + \Delta_0/\Delta} P(\varepsilon' \rightarrow \varepsilon) + \\ & + \frac{p}{2p + \Delta_0/\Delta} P(\varepsilon' \rightarrow \varepsilon' - \varepsilon). \end{aligned} \quad (29)$$

Уравнение (28) полностью аналогично уравнению (27). С другой стороны, из формы (28) следует, что оно описывает торможение частиц в материале с сечением рассеяния $(2p + \Delta_0/\Delta)\Sigma$ с индикаторной рассеяния $P_{tot}(\varepsilon' \rightarrow \varepsilon)$ и поглощением, имеющим отрицательное сечение рассеяния $(-p\Sigma)$ (последнее обстоятельство отражает наличие процессов генерации частиц). В этом случае уравнение (28) полностью совпадает по своему образу с уравнением замедления (2), решение которого (см. (10)) было найдено ниже с помощью индикаторы рассеяния (6). Наконец, если в качестве $P_{tot}(\varepsilon' \rightarrow \varepsilon)$ мы используем выражение (6), то для модельной индикаторы рассеяния величины $\Delta(\varepsilon)$ и $\Omega^2(\varepsilon)$ должны быть заменены новыми моментами $\tilde{\Delta}(\varepsilon)$ и $\tilde{\Omega}^2(\varepsilon)$, соответствующими индикаторисе рассеяния $P_{tot}(\varepsilon' \rightarrow \varepsilon)$:

$$\tilde{\Delta}(\varepsilon') = \int_0^\varepsilon (\varepsilon' - \varepsilon) P_{tot}(\varepsilon' \rightarrow \varepsilon) d\varepsilon = \frac{\varepsilon' + \Delta_0/p}{2 + \Delta_0/p\Delta}, \quad (30)$$

$$\begin{aligned} \tilde{\Omega}^2(\varepsilon') = & \int_0^\infty (\varepsilon' - \varepsilon)^2 P_{tot}(\varepsilon' \rightarrow \varepsilon) d\varepsilon = \\ & = \frac{\varepsilon'^2 + \Omega^2(2 + \Delta_0/p\Delta) - 2\varepsilon'\Delta}{2 + \Delta_0/p\Delta}. \end{aligned} \quad (31)$$

В таком случае решение уравнения (28) может быть получено напрямую из решения (10). Для этого необходимо сделать подстановку (10): $\Sigma_s \rightarrow [2p + \Delta_0/\Delta]\Sigma$, $\Sigma_a \rightarrow -p\Sigma$, $\Delta \rightarrow \tilde{\Delta}$, $\Omega^2 \rightarrow \tilde{\Omega}^2$, $\gamma \rightarrow \tilde{\gamma} = \Omega^2/2\tilde{\Delta}$, которая приводит к следующему окончательному результату:

$$\begin{aligned} \phi(\varepsilon) = & \frac{\tilde{\gamma}(\varepsilon)\tilde{\beta}(\varepsilon)\delta(\varepsilon - \varepsilon_0)}{\tilde{\kappa}(\varepsilon)\tilde{\Sigma}_{eff}(\varepsilon)} + \frac{\tilde{\Sigma}_s(\varepsilon_0)}{\tilde{\Sigma}_{eff}(\varepsilon_0)} \frac{1}{\tilde{\kappa}(\varepsilon)\tilde{\Sigma}_{eff}(\varepsilon)} \times \\ & \times \exp \left\{ - \int_\varepsilon^{\varepsilon_0} \frac{d\varepsilon'}{\tilde{\kappa}(\varepsilon')\tilde{\Sigma}_{eff}(\varepsilon')} \tilde{\Sigma}_a(\varepsilon') \right\}, \end{aligned} \quad (32)$$

где

$$\tilde{\gamma} = \frac{\tilde{\Omega}^2}{2\tilde{\Delta}}, \quad \tilde{\Sigma}_{eff} = \tilde{\Sigma}_s + \tilde{\Sigma}_a \left[\frac{\tilde{\gamma}(\varepsilon')\tilde{\beta}(\varepsilon')}{\tilde{\kappa}(\varepsilon')} \right], \quad (33)$$

$$\tilde{\Sigma}_s = \left(2p + \frac{\Delta_0}{\Delta} \right) \Sigma, \quad \tilde{\Sigma}_a = -p(\varepsilon')\Sigma(\varepsilon'), \quad (34)$$

$$\tilde{\kappa}(\varepsilon') = \tilde{\Delta}(\varepsilon')\tilde{\beta}(\varepsilon') \left(1 - \frac{d\tilde{\gamma}}{d\varepsilon'} \right), \quad (35)$$

$$\begin{aligned} \tilde{\beta}(\varepsilon') = & \left(1 - \frac{d\tilde{\gamma}}{d\varepsilon'} \right) \times \\ & \times \left[\left(1 - \frac{d\tilde{\gamma}}{d\varepsilon'} \right) \left(1 - 2\frac{d\tilde{\gamma}}{d\varepsilon'} \right) - \tilde{\gamma} \frac{d^2\tilde{\gamma}}{d\varepsilon'^2} \right]^{-1}. \end{aligned} \quad (36)$$

В случае упругого рассеяния частиц одной массы, которое сферически симметрично в системе отсчета центра масс системы, получаем

$$\Delta = \tilde{\Delta} = \frac{\varepsilon'}{2}, \quad \Omega^2 = \tilde{\Omega}^2 = \frac{1}{3}\varepsilon'^2. \quad (37)$$

Используя соотношения (37) и подставляя $p(\varepsilon) = 1$, $\Delta_0 = I$, можно убедиться, что в этом случае функция распределения (36) такая же, как соответствующий результат, полученный ранее в работе [6].

Зная распределение энергии движущихся частиц (см. уравнение (32)), можно определить каскадную функцию $\nu(\varepsilon_0)$, определяющую полное число частиц, выбитых первичной частицей с энергией ε . Фактически, полное число возбужденных частиц первичной частицей является функцией ее энергии и равно

$$N(\varepsilon_0, t) = \int_0^{\varepsilon_0} f(\varepsilon, t) d\varepsilon, \quad (38)$$

$$\nu(\varepsilon_0) = \lim_{t \rightarrow \infty} N(\varepsilon_0, t). \quad (39)$$

С помощью закона сохранения числа частиц (17) находим $N(\varepsilon_0, t)$:

$$N(\varepsilon_0, t) = \int_I d\varepsilon p(\varepsilon) \Sigma(\varepsilon) \int_0^t \phi(\varepsilon, t') dt'. \quad (40)$$

Используя свойство преобразования Лапласа $\lim_{t \rightarrow \infty} \phi(\varepsilon, t') dt' = \lim_{s \rightarrow 0} \phi(\varepsilon, s)$, с помощью выражений (39) и (40) можно получить следующее выражение:

$$\nu(\varepsilon_0) = \int_I p(\varepsilon) \Sigma(\varepsilon) \phi(\varepsilon, s=0) d\varepsilon, \quad (41)$$

где $\phi(\varepsilon, s=0)$ — решение соответствующей стационарной задачи.

Подставляя выражение (36) в уравнение (41), находим следующее выражение для каскадной функции, выведенное при довольно общих предположениях о характере взаимодействия движущихся частиц между собой [7]:

$$\nu(\varepsilon_0) = \frac{\tilde{\Sigma}_s(\varepsilon_0)}{\tilde{\Sigma}_{eff}(\varepsilon_0)} \exp \left(- \int_I^{\varepsilon_0} \frac{d\varepsilon \tilde{\Sigma}(\varepsilon)}{\tilde{\kappa}(\varepsilon) \tilde{\Sigma}_{eff}(\varepsilon)} \right) - \frac{\tilde{\beta}(\varepsilon_0) \tilde{\gamma}(\varepsilon_0) \tilde{\Sigma}_a(\varepsilon_0)}{\tilde{\kappa}(\varepsilon_0) \tilde{\Sigma}_{eff}(\varepsilon_0)}. \quad (42)$$

4. РАСЧЕТ КАСКАДА ЭЛЕКТРОННЫХ СТОЛКОВЕНИЙ В ОБЛУЧАЕМЫХ МАТЕРИАЛАХ

В предлагаемой модели будем считать, что вырывание электрона из атомной оболочки происходит тогда, когда он получает энергию, большую чем некоторое пороговое значение I (средняя энергия ионизации электронов внешней оболочки атомов). В принятой модели процессы потери энергии, проходящие без ионизации, не имеют физического смысла, поэтому

$$\Delta_0(\varepsilon') = \begin{cases} 0, & \varepsilon' < I, \\ I, & \varepsilon' \geq I. \end{cases} \quad (43)$$

При вычислении каскадной функции было использовано нерелятивистское выражение для дифференциального сечения рассеяния электрона на атоме без учета эффектов обменного взаимодействия между электронами [8]

$$\sigma_{diff}(\varepsilon' \rightarrow \varepsilon) = \frac{\pi Z e^4}{(\varepsilon' - \varepsilon)^2 \varepsilon'}, \quad (44)$$

где ε' — энергия налетающего электрона после столкновения. Полное сечение рассеяния электрона на атоме с зарядом Z без учета обменного взаимодействия, а также эффектов, связанных с возбуждением атома без сопутствующей ионизации, имеет вид

$$\sigma(\varepsilon') = \int_0^{\varepsilon' - I} \sigma_{diff}(\varepsilon' \rightarrow \varepsilon) d\varepsilon = \frac{\pi Z e^4}{\varepsilon'} \left(\frac{1}{I} - \frac{1}{\varepsilon'} \right).$$

Средняя потеря энергии для электрона с кинетической энергией выше пороговой величины равна

$$\Delta(\varepsilon) = \frac{\int_0^{\varepsilon - I} (\varepsilon' - \varepsilon) \sigma_{diff}(\varepsilon' \rightarrow \varepsilon) d\varepsilon'}{\int_0^{\varepsilon - I} \sigma_{diff}(\varepsilon' \rightarrow \varepsilon) d\varepsilon'} = \frac{I \ln(\varepsilon'/I)}{1 - I/\varepsilon'}, \quad (45)$$

$$\Omega^2(\varepsilon) = \frac{\int_0^{\varepsilon' - I} (\varepsilon' - \varepsilon)^2 d\sigma(\varepsilon')}{\int_0^{\varepsilon' - I} d\sigma(\varepsilon')} = \varepsilon' I. \quad (46)$$

Используем следующее выражение для каскадной функции, приведенное в работе [7]:

$$\nu(\varepsilon_0) = \frac{p(\varepsilon_0) \tilde{\gamma}(\varepsilon_0)}{\mu(\varepsilon_0) q(\varepsilon_0)} [1 + F(\varepsilon_0)] + F(\varepsilon_0), \quad (47)$$

где

$$F(\varepsilon_0) = \exp \left(\int_I^{\varepsilon_0} \frac{p(\varepsilon) d\varepsilon}{\mu(\varepsilon) \beta(\varepsilon) q(\varepsilon)} \right) - 1, \quad (48)$$

$$\mu(\varepsilon) = \frac{(\varepsilon + \Delta_0/p)(1 - \tilde{\gamma}')}{2 + \Delta_0/p\Delta}, \quad (49)$$

$$q(\varepsilon) = 2p + \frac{\Delta_0}{\Delta} - \frac{p\tilde{\gamma}}{\mu}. \quad (50)$$

Пренебрегая подпороговыми эффектами и полагая $\varepsilon_0 > \varepsilon > I$, получим $p(\varepsilon) = 1$. Полагая, что $\varepsilon_0 > \varepsilon \gg I$ и $\ln(\varepsilon/I) \gg 1$, можно получить асимптотику подынтегрального выражения:

$$\frac{p(\varepsilon)}{\mu(\varepsilon) \beta(\varepsilon) q(\varepsilon)} \sim \frac{I \ln(\varepsilon/I)}{\varepsilon}. \quad (51)$$

Выражение для каскадной функции в таком случае будет иметь вид

$$\nu(\varepsilon_0) = \frac{\varepsilon_0}{2aI} + O\left(\frac{\varepsilon_0/I}{\ln(\varepsilon_0/I)}\right), \quad (52)$$

где a определяется с помощью численного расчета и при $I = 10$ эВ, $\varepsilon_0 \geq 10$ кэВ равно 0.7. Каскадная функция для электронов запишется в виде

$$\tilde{\nu}(\varepsilon_0) = \nu(\varepsilon_0) - 1. \quad (53)$$

Можно заметить, что в случае больших энергий выражения (53) и (52) совпадают. Перепишем выражение (53) в виде

$$\tilde{\nu}(\varepsilon_0) = \nu(\varepsilon_0) - 1 = \xi(\varepsilon_0) \frac{\varepsilon_0}{2I}. \quad (54)$$

Тогда для коэффициента $\xi(\varepsilon_0)$ имеем

$$\xi(\varepsilon_0) = \frac{2I}{\varepsilon_0} (\nu(\varepsilon_0) - 1). \quad (55)$$

На рис. 1 представлена зависимость каскадной эффективности с использованием точной формулы (47). На рис. 1 видно, что для точного решения (47) при $\varepsilon > 1$ кэВ функцию можно считать постоянной и равной 1.4. Тогда выражение для каскадной функции при $\varepsilon > 1$ кэВ можно записать в простом виде:

$$\tilde{\nu}(\varepsilon_0) = \frac{\varepsilon_0}{2aI} = 0.7 \frac{\varepsilon_0}{I}. \quad (56)$$

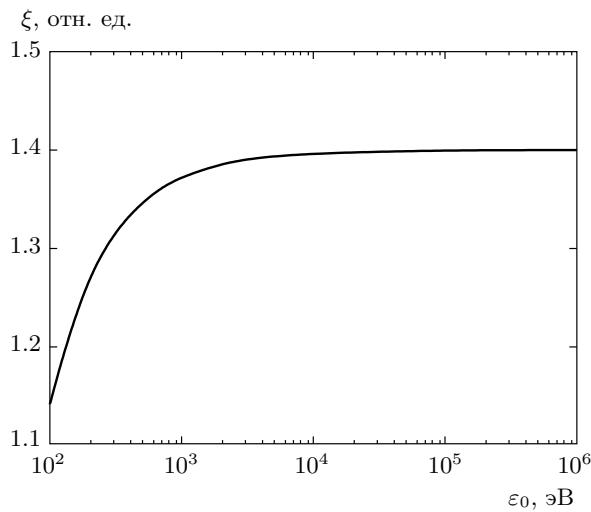


Рис. 1. Зависимость каскадной эффективности от энергии первичного электрона

5. СТАТИСТИЧЕСКАЯ ОЦЕНКА КАСКАДНОЙ ФУНКЦИИ

Для проверки полученных в предыдущем параграфе выражений вычислим среднее число каскадных электронов прямым методом Монте-Карло. Будем считать, что у движущегося электрона нет других потерь энергии, кроме процессов возбуждения атомных электронов. Примем, что исход каждого взаимодействия зависит только от кинетической энергии электрона, а не от предыдущих столкновений. При этом пренебрежем взаимодействием вторичных каскадных частиц. Тогда на каждом шаге налетающая и образовавшаяся частицы (электроны) движутся независимо друг от друга. Каскад длится до тех пор, пока энергия всех частиц не станет меньше пороговой.

Оценим статистически каскадную эффективность для случая твердых сфер для сравнения с результатом, приведенным в работе [9]. Будем считать, что вероятность $P_{hs}(\varepsilon' \rightarrow \varepsilon) = 1/\varepsilon'$, а возбуждение каскадных частиц будет происходить при $(\varepsilon' - \varepsilon) \geq I$ и $\varepsilon' > 2I$; в остальных случаях частица будет терять энергию без образования новых каскадных частиц. Непосредственным расчетом получается значение $\tilde{\nu}_{hs}(\varepsilon_0) \approx 0.47\varepsilon_0/I$. Полученное выражение близко по значению с результатом в работе [9], где аналитически получено $\tilde{\nu}(\varepsilon_0) \rightarrow 0.5\varepsilon_0/I$.

Вероятность перехода налетающего электрона с энергией ε' в состояние с энергией ε с учетом резерфордовского потенциала взаимодействия с электро-

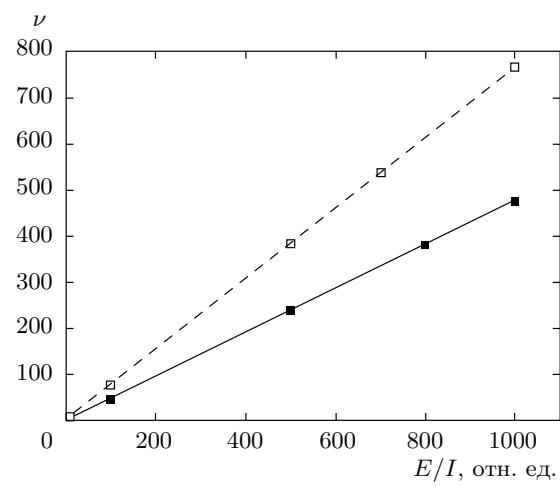


Рис. 2. Среднее число выбитых каскадных частиц в зависимости от энергии первичной налетающей частицы, отнесенной к потенциальному возбуждению: ■ — потенциал твердых сфер, □ — кулоновский потенциал

ном в атоме имеет вид

$$P_r(\varepsilon' \rightarrow \varepsilon) = \begin{cases} 0, & \varepsilon' \leq I, \\ \varepsilon'I/(\varepsilon' - I)(\varepsilon' - \varepsilon)^2, & \varepsilon' \geq I. \end{cases} \quad (57)$$

Численным расчетом получим следующую зависимость для среднего числа каскадных частиц по числу испытаний от энергии первично выбитого электрона: $\tilde{\nu}_r(\varepsilon_0) \approx 0.78\varepsilon_0/I$.

Полученный результат хорошо согласуется с аналитической зависимостью (57). На основе изложенных выше предположений были проведены численные расчеты, графики для которых приведены на рис. 2. На рисунке представлена зависимость для значения среднего числа каскадных частиц от энергии первичной налетающей частицы (инициатора каскада), отнесенной к потенциальному возбуждению частицы, как для кулоновского потенциала взаимодействия, так и для потенциала твердых сфер.

6. ВЫВОДЫ

- Найдено выражение для каскадной функции, описывающей размножение быстрых частиц в результате упругого рассеяния в общем случае для произвольного потенциала парного взаимодействия между частицами с использованием кинетического уравнения Больцмана, описывающего размножение быстрых частиц в результате процессов упругого рассеяния.

2. Получено аналитическое выражение для электронной каскадной функции с использованием сечения рассеяния Резерфорда. Показано, что значение каскадной эффективности $\xi(\varepsilon_0)$ слабо зависит от энергии первичного электрона.
3. Найдено численное значение для электронной каскадной функции, которое определяет число выбитых электронов из атомных оболочек материала в зависимости от энергии налетающего электрона, с помощью метода Монте-Карло. Полученные результаты позволяют утверждать, что для нахождения выбитых электронов из атомных оболочек материала в результате упругого электрон-электронного рассеяния можно использовать решение кинетического уравнения Больцмана с модельной индикатрисой рассеяния для быстрых частиц.

ЛИТЕРАТУРА

1. А. И. Рязанов, С. А. Павлов, Е. В. Метелкин, А. В. Жемеров, ЖЭТФ **128**, 139 (2005).
2. Е. В. Метелкин, А. И. Рязанов, ЖЭТФ **117**, 402 (2000).
3. R. E. Marshak, Rev. Mod. Phys. **19**, 185 (1947).
4. G. Goertzel and E. Grueling, Nucl. Sci. Engin. **7**, 69 (1960).
5. Ю. А. Медведев, Е. В. Метелкин, Атомная энергия **41**, 105 (1976).
6. А. И. Ахиезер, И. А. Ахиезер, Препринт Харьковского физико-технического института (1975), с. 24.
7. A. I. Ryazanov and E. V. Metelkin, Radiat. Eff. Def. Sol. **52**, 15 (1980).
8. Л. Д. Ландау, Е. М. Либшиц, *Теоретическая физика*, т. 3, *Квантовая механика*, Наука, Москва, § 148 (2002).
9. Г. Н. Кинчин, Р. С. Пиз, УФН **60**, 590 (1956).