

УСПЕХИ ФИЗИЧЕСКИХ НАУК**СМЕЩЕНИЕ АТОМОВ В ТВЕРДЫХ ТЕЛАХ ПОД
ДЕЙСТВИЕМ ИЗЛУЧЕНИЯ****Г. Н. Кинчин и Р. С. Пиз *)****СОДЕРЖАНИЕ****I. Образование смещенных атомов**

1. Энергетические соображения	591
а) Энергия смещения	591
б) Пороговые значения энергии излучения	591
2. Число смещенных атомов	592
а) Движущиеся атомы. Основы теории	593
б) Движущиеся атомы. Столкновения твердых шаров	595
в) Движущиеся атомы. Резерфордовские столкновения	597
г) Движущиеся атомы, замедляющиеся до полной остановки	599
д) Быстрые нейтроны	600
е) Электроны	601
ж) Гамма-лучи	603
3. Распределение смещенных атомов и вакансий	604
а) Модели, основанные на рассмотрении столкновений	604
б) «Клинья смещения» и «тепловые клинья»	605
4. Эффекты в соединениях	607
а) Столкновения, приводящие к замещению атомов	607
б) Разупорядочение	608

II. Восстановление дефектов

1. Рекомбинация внедренных атомов и вакансий	609
а) Пары внедренных атомов и вакансий, находящихся близко друг к другу	609
б) Беспорядочное распределение внедренных атомов и вакансий	610
2. Дополнительные процессы	611
3. Накопление нарушений	611
4. Насыщение	613
5. Радиационный отжиг	614
Цитированная литература	615

*) §§ 2 и 3 из обзора G. H. Kinchin, R. S. Pease, Reports on Progress in Physics 18, 1 (1955). Перевод с английского А. Х. Брегера под ред. проф. Г. С. Жданова. Статья тесно связана с обзором Глена. См. УФН, LX, вып. 3, стр. 445.)

I. ОБРАЗОВАНИЕ СМЕЩЕННЫХ АТОМОВ

1. Энергетические соображения

а) Энергия смещения. Из теплот сублимации и других термодинамических данных известно, что энергия связи атомов в твердых телах близка к 5 эв. Следует ожидать, что для смещения атома из его положения в решетке внутри твердого тела требуется большее количество энергии. Во-первых, при смещении атома в твердом теле должно быть разорвано большее число связей, чем при испарении атома с поверхности; во-вторых, между положением атома в узле решетки и стабильным положением в междузлии должен существовать некоторый потенциальный барьер. Результаты детальных расчетов для меди были опубликованы Хантингтоном (Г-99в *); он нашел, что необходимая энергия зависит от направления (относительно осей кристалла), в котором смещается атом, и составляет от 18 до 43 эв.

Экспериментальные данные, полученные из пороговых энергий для радиационных эффектов, приводят к следующим величинам: 31 эв для германия Г-120а, 25 эв для меди Г-64, меньше 12 эв для атомов меди в Cu_3Au Г-616 и больше (или равно) 25 эв для атомов железа в сплаве железо — медь Г-53а **). Пороговые энергии для распыления, с одной стороны, не очень надежны для того, чтобы их использовать при решении вопросов радиационных нарушений, с другой стороны, экспериментальное определение этих величин довольно сложно. Однако эти значения правильно передают порядок величины. Недавно Вернер¹ нашел, что для 23 металлов энергии смещения составляют от 20 эв для Pb до 180 эв для Hf.

Поскольку энергия смещения изменяется в зависимости от направления отдачи, а также должна быть различной для разных веществ и не может быть легко вычислена, то самым простым способом является принимать, следуя Зейтцу Г-196а, для всех случаев одно значение 25 эв и изменять его только в тех случаях, когда это непосредственно следует из экспериментальных данных. Этот способ использовался в опубликованных до сих пор работах.

б) Пороговые значения энергии излучения. Если принять для дальнейших рассуждений величину энергии смещения 25 эв, то можно легко вычислить минимальную энергию, необходимую для образования смещенных атомов различными видами

*) В тех случаях, когда ссылка на литературу в этой статье совпадает со ссылкой в обзоре Глена, мы приводим номер по списку литературы, приведенному после перевода статьи Глена (УФН, LX, вып. 3, стр. 556 и далее) с буквой «Г» впереди. Остальные ссылки на литературу в дополнении имеют обычную нумерацию в соответствии со списком, приведенным в конце обзора Кинчина и Пиза. — *Прим. перев.*

**) См. табл. 3 в переводе обзора Глена. — *Прим. перев.*

Таблица I

Пороговая энергия излучения, необходимая для смещения атома
при $E_d = 25 \text{ эв}$

Атомный вес неподвижных атомов	10	50	100	200
Нейтроны, протоны (эв)	76	325	638	1263
Электроны, γ -лучи (Мэв)	0,10	0,41	0,68	1,10
α -частицы (эв)	31	91	169	325
Осколки деления (эв)	85	30	25	27

излучения. Результаты такого расчета приведены в таблице I. В случае тяжелых частиц применялось следующее выражение для максимальной энергии E_{max} , передаваемой движущейся частицей с массой M_1 и энергией E неподвижному атому с массой M_2 :

$$E_{\text{max}} = \lambda E, \quad (1)$$

где

$$\lambda = \frac{4 M_1 M_2}{(M_1 + M_2)^2}. \quad (1a)$$

Для электронной бомбардировки существенны релятивистские эффекты; ввиду этого мы пользовались выражением

$$E_{\text{max}} = \frac{2E(E + 2mc^2)}{M_2 c^2}, \quad (2)$$

где m — масса электрона, c — скорость света. В случае γ -лучей пороговая энергия определяется энергией фото- или комптоновских электронов и поэтому приближенно равна пороговой энергии для электронов. Прямое взаимодействие γ -лучей с ядром имеет значение в редких случаях за исключением случая отдачи ядер при испускании γ -квантов, как в процессе Сцилларда — Чалмерса (см. ²).

2. Число смещенных атомов

Атомы, смещающиеся при непосредственных столкновениях с бомбардирующими частицами, мы называем «первичными выбитыми атомами» в отличие от вторичных (т. е. атомов, смещенных вследствие столкновений с первичными). В §§ 2, а) — в) мы рассматриваем столкновения движущихся атомов вообще и получаем выражения как для числа смещенных атомов, образованных первичными атомами, так и для сечений образования первичных выбитых атомов бомбардирующими ионами. Мы применяем эти выражения при вычислении общего числа смещенных атомов для не-

которых случаев и в последующих параграфах для случаев бомбардировки нейтронами, электронами и γ -лучами.

В настоящее время не имеется точных экспериментальных данных по определению числа смещенных атомов, но некоторые грубые оценки дают возможность сопоставить вычисленные и наблюдаемые величины, приведенные в таблице II. Из этих данных видно, что вычисленные значения обычно выше экспериментальных, что, вероятно, объясняется наличием рекомбинации. В каждом случае экспериментальная оценка основана на некоторых предположениях, связывающих наблюдаемые эффекты с числом смещенных атомов. Эти предположения кратко приведены в таблице II.

Таблица II

Отношение вычисленных и наблюдаемых чисел смещенных атомов

Вещество	Излучение	Отношение вычислен- ного числа к наблю- денному	Предположения
Медь Серебро Золото	Дейтроны, 10 Мэв То же » »	3 4 4	Электрическое сопротивление увеличивается на $2\mu\Omega$ см на 1% дефектов Френкеля *)
Германий	Электроны 1,5 Мэв	2	
Кварц	Быстрые нейтроны	5	
Нитрид бора	Li и α -ча- стицы	5	Изменения интенсивности рентгеновских линий заметны при содержании дефектов Френкеля $>1\%$

*) В этом обзоре мы сохранили термин «дефекты Френкеля», используемый авторами. В обзоре Глена этот дефект называется: пара «вакансия — внедренный атом». — *Прим. перев.*

а) Движущиеся атомы. Основы теории. Расчеты для движущихся атомов были сделаны Зейтцем ^{Г-196а}, Озеровым ^{Г-166} и Бринкменом ^{Г-276}. Хотя большая часть результатов Зейтца правильна, его расчет основан на использовании приближения Борна, которое неприменимо для рассмотрения происходящих при этом столкновений. Пределы применимости различных приближений рассмотрены Бором ³ и Вильямсом ⁴, и для всех столкновений, представляющих для нас интерес, нужно пользоваться классическим

приближением. Озеров главным образом рассматривает случай смещения атомов продуктами деления. Бринкмен, который исправил ошибку в работе Озерова, рассматривает случай идентичных движущихся и неподвижных атомов, но явно не вычисляет числа смещенных атомов. Наше теоретическое рассмотрение основано на работах Книппа и Теллера⁵ и Бора³.

Основное приближение состоит в том, что атомы смещаются вследствие кулоновского взаимодействия между ядрами и что эффект экранирующих электронов состоит в прекращении этого взаимодействия на расстоянии, близком к $a_0/Z^{1/3}$, где a_0 — борковский радиус, Z — атомный номер. Когда кинетическая энергия движущегося атома меньше потенциала кулоновского взаимодействия двух ядер, находящихся на расстоянии, равном радиусу экранирующего электронного облака, то наличие этого экрана приводит к тому, что столкновение происходит по типу столкновения твердых шаров. Верхний предел энергии L_A для применимости этого приближения определяется (см.³) уравнением

$$L_A = 2 E_R Z_1 Z_2 \frac{(Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{1/2} (M_1 + M_2)}{M_2}, \quad (3)$$

где E_R — постоянная Ридберга (13,60 эВ); Z — атомные номера; M — массы атомов. Значки 1 и 2 относятся к движущемуся и неподвижному атомам. При энергиях, превышающих L_A , наличие экранирующих электронных облаков исключает резерфордовские столкновения с параметрами удара $\frac{a_0}{(Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{1/3}}$. При этом минимальная энергия E^* , которая может быть передана при столкновении, определяется уравнением

$$E^* = 4 E_R^2 Z_1^2 Z_2^2 (Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3}) \frac{M_1}{M_2 E_d}. \quad (4)$$

До тех пор пока E^* больше, чем энергия смещения E_d , все резерфордовские столкновения приводят к смещению атомов; но когда энергия E движущихся атомов превосходит L_B , где

$$L_B = 4 E_R^2 Z_1^2 Z_2^2 (Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3}) \frac{M_1}{M_2 E_d}, \quad (5)$$

то смещения происходят только при некоторых из резерфордовских столкновений. Легко показать, что когда $E \gg L_B$, то половина энергии, теряемой при резерфордовских столкновениях, рассеивается в колебаниях решетки без смещения атомов.

Другим важным видом взаимодействия является электронное возбуждение. Следуя Зейтцу^{Г-196а}, мы принимаем, что при $E > L_C$

расход энергии на этот процесс во много ($\sim 10^3$) раз превосходит потери энергии на все другие виды взаимодействий, а при $E < L_C$ электронного возбуждения вообще не происходит. Величина L_C определяется наименьшим потенциалом возбуждения I_t валентных электронов и грубо описывается (для изоляторов) уравнением

$$L_C = \frac{M_1}{m} \frac{I_t}{8}, \quad (6a)$$

где I_t — вполне определенная величина, соответствующая краю первой главной оптической полосы поглощения.

В металлах, где валентные электроны свободны, потери энергии на возбуждение электронов имеют место при всех энергиях. Озеров показал, что при достаточно низких энергиях этим расходом энергии можно пренебречь по сравнению с потерями энергии при столкновениях. Удовлетворительного критерия для энергии, выше которой преобладают электронные потери, до сих пор не найдено; выражения, полученные Зейтцем, непригодны ввиду того, что он пользовался при их выводе приближением Борна. Однако очевидно, что поскольку скорость движущегося атома значительно меньше, чем скорость электрона в максимуме распределения Ферми, то лишь небольшая часть электронов может быть возбуждена, и мы (по грубой аналогии с изоляторами) принимаем:

$$L_C = \frac{1}{16} \frac{M_1}{m} \varepsilon_0 \approx \frac{1}{16} \frac{M_1}{m} \pi a_0^2 E_R (3 N_0 \sqrt{\pi})^{2/3}, \quad (6б)$$

где ε_0 — энергия свободных электронов по Ферми;

N_0 — число атомов в единице объема.

В случае тяжелых движущихся атомов предположение о резком обрыве ионизационных потерь является очень грубым вследствие больших изменений эффективного заряда движущихся атомов. Книпп и Теллер⁵ показали, что ионизационные потери и потери при столкновениях имеют примерно одинаковую величину в довольно широком интервале энергий. Наши значения L_C обозначают пределы энергии, ниже которых можно пренебречь ионизационными потерями.

В таблице III приведены некоторые значения L_A , L_B и L_C .

б) Движущиеся атомы. Столкновения твердых шаров. Характерная особенность столкновений твердых шаров состоит в том, что вероятность передачи данного количества энергии ΔE не зависит от величины ΔE для $0 \leq \Delta E \leq \lambda E$ и равна нулю за пределами этого интервала. Рассмотрим одноатомное твердое тело, в котором может быть образован первичный выбитый атом с энергией $\bar{E}$. При первом столкновении этого атома его энергия распределяется между двумя атомами, а в результате второй серии столкновений энергия распределяется между четырьмя атомами. Подобным образом после p -й серии столкновений эта энергия распре-

Таблица III

Пределы энергии для процессов столкновения

Вещество	Движущийся атом	Пределы энергии (эв)		
		L_A	L_B	L_C
Алмаз	Углерод	$5 \cdot 10^3$	$3 \cdot 10^5$	$1,5 \cdot 10^4$ (а) *)
Алмаз	Дейтрон	$4 \cdot 10^2$	$8 \cdot 10^2$	$2 \cdot 10^3$ (а)
Al	Al	$3 \cdot 10^4$	$9 \cdot 10^6$	$1,7 \cdot 10^4$
Al	Дейтрон	$1 \cdot 10^3$	$2 \cdot 10^3$	$1,3 \cdot 10^3$
KCl	Аргон	$6 \cdot 10^4$	$4 \cdot 10^7$	$7 \cdot 10^4$ (б)
KCl	Дейтрон	$1,4 \cdot 10^3$	$4 \cdot 10^3$	$3 \cdot 10^3$ (б)
Cu	Cu	$2 \cdot 10^5$	$4 \cdot 10^8$	$5 \cdot 10^4$
Cu	Дейтрон	$3 \cdot 10^3$	$8 \cdot 10^3$	$1,6 \cdot 10^3$
Au	Au	$2 \cdot 10^6$	$4 \cdot 10^{10}$	$1,2 \cdot 10^5$
Au	Дейтрон	$1 \cdot 10^4$	$4 \cdot 10^4$	$1,2 \cdot 10^3$

*) Значения первого уровня возбуждения валентных электронов взяты: (а) из книги Мосса ⁶ и (б) из работы Шнейдера и Обриана ⁷.

делится между 2^p атомами и число атомов в интервале энергии dE составит

$$N_p(E) dE = 2^p \left(\ln \frac{\bar{E}}{E} \right)^{p-1} \frac{dE}{\bar{E} (p-1)!}. \quad (7)$$

Этот результат применим к свободным неподвижным атомам, но смещаются только те атомы, которые получают количество энергии, превышающее пороговую энергию E_d . Далее, только атом, обладающий энергией, большей чем $2E_d$, может осуществить такое столкновение с неподвижным атомом, после которого энергия обоих атомов будет превышать E_d . Таким образом, мы предполагаем, что атомы, обладающие энергией от E_d до $2E_d$, смещаются, но не могут сами привести к дальнейшему увеличению общего числа смещенных атомов. Можно показать, что число таких атомов, образующихся в p -й серии столкновений, равно $E_d N_p(2E_d)$, так что общее число смещенных атомов N_d определяется уравнением

$$N_d = \sum_{p=1}^{p=\infty} E_d N_p(2E_d) = \frac{\bar{E}}{2E_d}. \quad (8a)$$

Это выражение правильно только для $\bar{E} > 2E_d$. Очевидно, что для $0 \leq \bar{E} \leq 2E_d$

$$N_d = 1. \quad (8b)$$

Так как уравнение (8a) линейно относительно $\bar{E}$, то оно применимо

также в том случае, когда $\bar{E}$ представляет среднюю энергию группы первичных атомов с энергией, превышающей $2E_d$. Легко показать, что это уравнение также применимо, когда массы исходного движущегося и неподвижного атомов различны, — при условии $2E_d/\bar{E} \ll \lambda$.

Простое рассуждение, принадлежащее Фрау (Т. М. Fry), также приводит к уравнению (8). Число смещенных атомов может увеличиваться только до тех пор, пока энергия движущегося атома, сталкивающегося с неподвижным атомом, превышает $2E_d$. При таких столкновениях возникают атомы с энергией в интервале $0 - 2E_d$ с однородным энергетическим распределением и средней энергией E_d . Следовательно, число смещенных атомов равно $\bar{E}/2E_d$. Физические предположения, сделанные при выводе уравнения (8а), таковы, что это уравнение, вероятно, дает завышенное число смещенных атомов.

Зейтц утверждает, что уравнение

$$N_d = \left(\frac{E'}{E_d} \right)^{1/2}, \quad (9)$$

где E' — средняя энергия всех первичных смещенных атомов, является хорошим приближением в тех случаях, когда E' в несколько раз больше E_d . Сопоставление с уравнениями (8а) и (8б) показывает, что согласие может иметь место до $\bar{E} \sim 10E_d$. Озеров дает приблизительное решение, основанное на модели Томаса — Ферми, в которой учитывается электростатическое взаимодействие экранирующих электронных облаков. Его результаты, которые нельзя представить в простой аналитической форме, приводят к значениям N_d примерно на 30% ниже, чем вычисленные по уравнению (8а). Этот расчет содержит ошибку, на которую указал Бринкмен, а также некоторые не вполне обоснованные предположения; следовательно, результаты Озерова следует рассматривать лишь как грубое приближение к точному уравнению (8а).

в) Движущиеся атомы. Резерфордские столкновения. Если $E > L_B$, то, применяя обычную теорию незранированных ядер³, легко вычислить сечение σ_p для резерфордовского столкновения, в котором передается энергия, большая чем E_d , а именно:

$$\sigma_p = 4M_1 Z_1^2 Z_2^2 E_R^2 \left(1 - \frac{E_d}{\lambda E} \right) \frac{\pi a_0^2}{M_2 E_d E} \quad (10)$$

[обозначения см. в § 2, а)]; πa_0^2 имеет величину $8,8 \cdot 10^{17} \text{ см}^2$.

Член $\left(1 - \frac{E_d}{\lambda E} \right)$ очень близок к единице для всех случаев, пред-

ставляющих интерес, и может быть, следовательно, опущен. Таким образом, сечение увеличивается с уменьшением энергии движущегося атома. Из уравнения (10) следует, что число первичных смещенных атомов изменяется обратно пропорционально квадрату их энергии и их средняя энергия определяется уравнением

$$\bar{E} = E_d \ln \frac{\lambda E}{E_d}. \quad (11)$$

Как указал Зейтц, логарифмический член мало зависит от точных значений λ и E ; поэтому для большинства практически встречающихся случаев отношение $\bar{E}/E_d$ составляет от 3 до 15. При таких энергиях для расчета числа атомов, смещенных первичными, выбитыми со своих мест атомами, можно использовать результаты, полученные для столкновений твердых шаров. Из уравнений (8а) и (8б) среднее общее число смещенных атомов, образующихся на каждый первичный выбитый атом, определяется уравнением

$$N_d = \frac{1}{2} \left\{ 1 + \ln \frac{\lambda E}{2E_d} \right\}. \quad (12)$$

Это уравнение можно непосредственно применять к таким случаям, как облучение тонких фольг на циклотроне; для меди, облученной дейтронами с энергией 10 Мэв, мы получаем $\sigma_p = 6900$ барн; $\bar{E} = 2700$ эв и $N_d = 5,8$.

Если $L_A < E < L_B$, как в случае продуктов деления и энергичных первичных выбитых атомов, то все резерфордовские столкновения приводят к образованию смещенных атомов; при этом σ_p приблизительно постоянно и равно $\frac{\pi a_0^2}{Z_1^{1/3} + Z_2^{1/3}}$. Среднюю энергию

первичного выбитого атома и величину N_d можно оценить, если заменить в уравнении (11) E_d на E^* .

Как Бринкмен, так и Озеров улучшают наше приближение, согласно которому имеет место резкое прекращение ядерного взаимодействия, путем рассмотрения передачи энергии между двумя атомами с жестким распределением зарядов, рассматриваемыми по теории Томаса — Ферми. Бринкмен дает уравнение для σ_p в случае, когда $Z_1 = Z_2$, правильное для всех энергий, которое подтверждает условие $E > L_B$ для уравнения (10) и показывает, что при этом условии следует ожидать медленного изменения σ_p с E . Приближенные результаты Озерова показывают, что ядерные резерфордовские столкновения являются главным источником потерь энергии до значений, при которых доминирующим становится взаимодействие типа твердых шаров. Оба эти исследователя использовали приближенную форму потенциала Томаса — Ферми и принимали, что радиус экранирующего электронного облака равен $2,09a_0/Z_2^{1/3}$,

Книпп и Теллер приводят значение $0,85a_0/Z_2^{1/3}$ (при предположении $Z_2 > Z_1$), а Бор приводит величину $\frac{a_0}{(Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{1/2}}$.

Мы приняли величину, данную Бором.

г) Движущиеся атомы, замедляющиеся до полной остановки. Мы уже показали, что общее число смещенных атомов, образовавшихся при замедлении атома с энергией E до полной остановки, равно $E/2E_d$, если $E < L_A$. При условии $E < L_C$ этот результат верен также и для $L_A < E < L_B$, так как основная потеря энергии в этой области обусловлена резерфордскими столкновениями, приводящими к образованию первичных выбитых атомов (см. также Г-206а). Если $E > L_B$, то только часть энергии расходуется на эти столкновения и вышеуказанный результат оказывается неверным; для случая $E \gg L_B$ общее число смещенных атомов приблизительно равно $E/4E_d$.

Однако обычно, когда $E > L_B$, то $E > L_C$ и потери на электронное возбуждение должны быть приняты во внимание. В случае больших энергий, $E \gg L_C$, $E \gg L_B$, эти потери являются доминирующими и определяются уравнением

$$-\frac{dE}{dx} = 2\pi (qZ_1)^2 e^4 Z_2 N_0 \left(\frac{M_1}{mE}\right) \ln \frac{4E_m}{M_1 I}, \quad (13)$$

где e — заряд электрона; N_0 — число атомов в единице объема; I — средний потенциал ионизации неподвижных атомов, а qZ_1 — эффективный заряд движущегося атома. Подробное обсуждение уравнения (13) и связанных с ним величин I и q дано Бете и Ашкиным⁸ и Аллисоном и Уоршоу⁹.

Комбинируя уравнения (13), (10) и (12), находим, что если атом теряет энергию ΔE , то он смещает ΔN_t атомов, где

$$\Delta N_t = P \frac{\Delta E}{E_d} \quad (14)$$

и

$$P = mZ_2 \frac{1 + \ln \frac{\lambda E}{2E_d}}{4M_2 q^2 \ln \frac{4E_m}{M_1 I}}. \quad (14a)$$

При $q \approx 1$ P обычно равно $10^{-3} - 10^{-4}$.

Для очень легких движущихся атомов (например, для α -частиц, возникающих в результате радиоактивного распада) q и I постоянны в большом интервале значений энергии. При этом P настолько незначительно зависит от E , что можно без серьезных ошибок

пользоваться средним значением. Кроме того, интервал энергии $L_B - L_C$ невелик и уравнение (14) можно применять с постоянным средним значением P ко всем энергиям, превышающим L_C .

Таким образом, общее число N_t атомов, смещенных очень легким движущимся атомом с энергией E_0 (при замедлении его до полной остановки), равно

$$N_t = \frac{P(E_0 - L_C) + bL_C}{E_d}, \quad (15)$$

где P определяется по уравнению (14а); L_C определяется уравнением (6), а $b = \frac{1}{2}$, если $L_B > L_C$, или $b = \frac{1}{4}$, если $L_B \ll L_C$. По существу такой же результат был получен Зейтцем. В тех случаях, когда преобладает член bL_C , значительная неопределенность вносится в процессе определения L_C , который является почти только качественным.

Случай тяжелых движущихся атомов с $E > L_C$ является более сложным, потому что потери на ионизацию главным образом определяются изменениями эффективного заряда. Кроме того, L_B обычно столь велико, что уравнение (10) (если оно вообще применимо) становится неприменимым в большом интервале энергий. Этот случай детально рассмотрен Озеровым. По существу уравнение (13) заменено полуэмпирическим выражением, E_d заменено величиной E^* по уравнению (11) и сделан ряд усреднений с целью облегчения возникающих при этом математических трудностей. Такое рассмотрение существенно для случая осколков. В случае быстро движущихся первичных выбитых атомов исходная энергия редко превышает L_C , и часто оказывается достаточным предположить, что вся избыточная энергия расходуется на ионизационные потери, так что число смещенных атомов равно $L_C/2E_d$.

д) Быстрые нейтроны. Обычно для радиационных исследований используются нейтроны, образующиеся при делении. Уатт¹⁰ приводит энергетический спектр нейтронов деления U^{235} и Pu^{239} ; спектр имеет максимум при 0,7 Мэв и среднюю энергию 2 Мэв.

Столкновения нейтронов принадлежат к простым столкновениям типа твердых шаров и поэтому энергетический спектр отдачи $N(E)dE$ для атомов, испытавших столкновения с нейтронами, определяется уравнением

$$N(E)dE = \frac{dE}{E_{\max}} (0 \leq E \leq E_{\max}), \quad (16)$$

где $E_{\max}$ вычисляется по уравнению (1).

Только ничтожная часть $E_d/E_{\max}$ атомов, столкнувшихся с нейтронами, не смещается, так что σ_p — сечение образования пер-

вичных атомов — является полным сечением для нейтронов. Для тяжелых элементов $E_{\max}$ обычно не превышает предела ионизации L_C .

Применяя результаты предыдущих параграфов, можно вычислить общее число N_d смещенных атомов, приходящееся в среднем на каждый быстрый нейтрон:

$$N_d = \frac{E_{\max}}{4E_d}. \quad (17)$$

Для более легких элементов $E_{\max}$ обычно превышает L_C , но, за исключением очень легких элементов, первичные выбитые атомы расходуют **ВСЮ** избыточную энергию на ионизацию; в этом случае

$$N_d = \frac{\left(2 - \frac{L_C}{E_{\max}}\right) L_C}{4E_d}. \quad (18)$$

На рис. 1 приведены значения N_d для нейтронов с энергией 2 Мэв при различных значениях параметра $\frac{L_C m}{M_2}$. Этот параметр представляет собой функцию, которая не очень резко изменяется с изменением M_2 и для многих веществ близка к 1 эв. Форма этих кривых показывает, что нейтроны с энергией 2 Мэв образуют максимальное число смещений в элементах со средним и небольшим атомным весом. Тяжелые ядра получают меньшую энергию отдачи; более легкие ядра получают большее количество энергии, но расходуют значительную часть этой энергии на ионизацию¹¹.

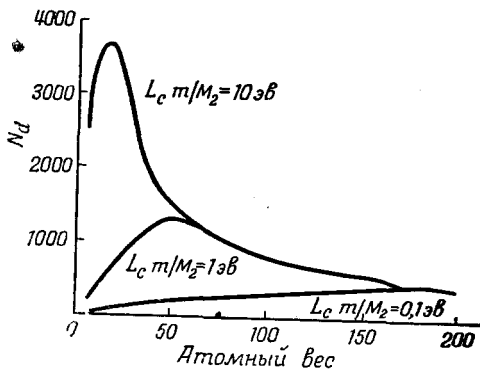


Рис. 1. Среднее число смещенных атомов, приходящихся на один первичный выбитый атом при бомбардировке нейтронами с энергией 2 Мэв, как функция атомного веса.

Озеров Г-166 применил выведенные им более сложные выражения, приведенные в § 2, в), для вычисления числа атомов, смещенных быстрыми нейтронами; как Озеров, так и Зейтц приводят некоторые значения для случая быстрых нейтронов, замедляющихся до полной остановки.

е) Электроны. Электроны смещают атомы вследствие кулоновского взаимодействия с ядрами. Для этого электроны должны пройти сквозь электронную К-оболочку и, следовательно, можно пользоваться выражениями, выведенными на основе неэкранирован-

ного кулоновского поля. Однако мы не можем пользоваться уравнением (10), потому что электроны обычно имеют релятивистские скорости. Основой расчета является релятивистское выражение Мотта¹² для дифференциального сечения рассеяния. Это выражение нельзя привести к совершенно явному виду. Дагдейл и Грин^{Г-62}, используя приближение α^2 по Маккинли и Фешбаху¹³, получают

$$\sigma_p = \frac{4Z_2^2 E_R^2 E_{\max}}{m^2 c^4 E_d} \frac{1 - \beta^2}{\beta^4} \left[1 + 2\pi\alpha\beta \left(\frac{E_d}{E_{\max}} \right)^{1/2} - \frac{E_d}{E_{\max}} \left\{ 1 + 2\pi\alpha\beta + (\beta^2 + \pi\alpha\beta) \ln \left(\frac{E_{\max}}{E_d} \right) \right\} \right] \pi\alpha_0^2, \quad (19)$$

где $E_{\max}$ определяется по уравнению (2); β — отношение скорости электронов к скорости света; $\alpha = \frac{Z_2}{137}$. Маккинли и Фешбах считают, что их приближение α^2 является удовлетворительным при $Z \leq 27$ и $\beta \approx 1$; уравнение (19) для вычисления σ_p , вероятно, является адекватным и за пределами указанного интервала. Клонтц^{Г-119 а} и Денни^{Г-536} приходят по существу к аналогичным выражениям, основанным на приближении Мотта; имеются некоторые расхождения, которые можно исправить с помощью данных Бете и Ашкина⁸. На рис. 2 показана зависимость σ_p от энергии электронов для некоторых типичных случаев.

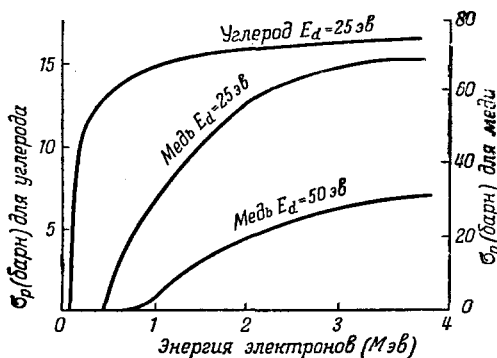


Рис. 2. Сечение образования первичных атомов, выбитых в результате бомбардировки электронами, в функции энергии.

Для малых значений β уравнение (19) сводится к уравнению (10). Зависимость σ_p для электронов от энергии главным образом обусловлена членом $1 - \frac{E_d}{\lambda E}$, так как $\lambda E \sim E_d$, в то время как для ионов этим членом можно пренебречь. Таким обра-

зом, в отличие от ионов σ_p для электронов увеличивается с энергией в интервале, представляющем практический интерес.

Кроме того, релятивистские факторы обычно начинают играть роль раньше, чем можно заметить какое-либо уменьшение, подобное уменьшению по уравнению (10). При высоких энергиях $M_2 c^2 \gg E \gg mc^2$, $E_{\max} \gg E_d$ сечение достигает величины

$$\sigma_p = \frac{8E_R^2 Z_2^2}{M_2 c^2 E_d} \pi \alpha_0^2 \quad (20)$$

и далее уже не изменяется. В первом приближении число первичных выбитых атомов изменяется обратно пропорционально их энергии и средняя энергия этих атомов определяется по уравнению, эквивалентному уравнению (11):

$$\bar{E} = \frac{E_d E_{\max}}{E_{\max} - E_d} \ln \frac{E_{\max}}{E_d}. \quad (21)$$

Во многих случаях $E_{\max}$ только в несколько раз больше, чем E_d , например в меди для электронов с энергией 1 Мэв значение $E_{\max} = 68$ эв. Поэтому общее число смещенных атомов незначительно превышает число первичных выбитых атомов.

Денни Γ^{536} показал, что энергия отдачи, идущая на тормозное излучение, составляет только небольшую поправку, и провел интегрирование σ_p по всему пробегу электронов.

ж) Гамма-лучи. До сих пор вопросу о смещении атомов γ -лучами уделялось мало внимания. Однако Дагдейл Γ^{616} показал, что действие γ -лучей может привести к измеримым эффектам. Основные данные, нужные для вычисления сечений, приведены в статье⁸. При облучении веществ с $Z_2 \lesssim 50$ γ -лучами с энергией около 2 Мэв преобладающим типом взаимодействия является эффект Комптона. Атомы смещаются комптоновскими электронами отдачи. При облучении меди γ -лучами с энергией 5 Мэв $\sigma_p \approx 0,1$ барна.

Для тяжелых элементов преобладающим является прямое смещение атомов вследствие отдачи, происходящей при фотоэлектрическом эффекте. Сечение фотоэлектрического поглощения σ_k приблизительно описывается (для случая $E \gg mc^2$) уравнением

$$\sigma_k = Z_2 \alpha^4 \frac{mc^2}{E} \exp \{-\pi \alpha + 2\alpha^2 (1 - \ln \alpha)\} \text{ барн}. \quad (22)$$

Здесь $\alpha = \frac{Z_2}{137}$. Для γ -лучей с энергией 5 Мэв это уравнение дает для очень тяжелых элементов сечения порядка 10^{-24} см².

Не каждое фотоэлектрическое поглощение приведет к смещению рассматриваемого атома, так как необходимо принимать во

внимание распределение испускаемых электронов относительно падающего γ -луча; ввиду этого величина σ_k , вычисленная по уравнению (22), может быть больше, чем σ_p .

По-видимому, при этих энергиях никакие другие процессы, связанные с γ -лучами, не играют такой роли, как только что рассмотренные два эффекта. При еще более высоких энергиях (≥ 10 Мэв; предел зависит от Z_2) преобладающим является процесс образования пар. Поэтому следует ожидать, что в таких случаях атомы будут смещаться возникающими при этом электронами и позитронами, а также вследствие отдачи ядер, принимающих участие в образовании пар.

3. Распределение смещенных атомов и вакансий

а) Модели, основанные на рассмотрении столкновений. Во всех случаях **большая часть** смещенных атомов покидает занимаемые ими узлы в решетке с энергиями, превышающими E_d не более чем в 2—3 раза. При этих энергиях движущийся смещенный атом будет на каждом пройденном им среднем междоатомном расстоянии испытывать, грубо говоря, одно столкновение и при каждом столкновении будет в среднем терять половину своей энергии. Если предположить, что атом при замедлении до энергии 1 эв захватывается в каком-либо междоузлии, то смещенный атом сможет обычно до захвата испытать не более шести-семи столкновений и, следовательно, будет находиться на расстоянии всего лишь нескольких междоатомных расстояний от образовавшейся при его смещении вакансии.

Наиболее простым случаем является бомбардировка электронами или облучение γ -лучами, когда энергия первичных, выбитых из своих узлов в решетке атомов недостаточна для смещения других атомов. В этом случае радиационное нарушение представляет собой статистическое распределение дефектов Френкеля, в котором расстояние между внедренным атомом и вакансией лишь в редких случаях может превышать четыре-пять междоатомных расстояний. Когда электроны могут передать первичным выбитым атомам количество энергии большее, чем $2E_d$, то эти атомы будут в свою очередь производить смещение других атомов и некоторые дефекты Френкеля будут представлять собой группы, состоящие из двух или более внедренных атомов и соответствующего числа вакансий, причем все эти дефекты будут находиться на расстоянии нескольких междоатомных расстояний друг от друга.

В случае быстро движущегося атома в первой части его пути, где $E > L_v$ и применимы уравнения (10) и (11), нарушение представляет собой группы, состоящие из нескольких вакансий и внедренных атомов, расположенные на сравнительно больших расстоя-

ниях друг от друга вдоль пути иона. По мере замедления атома сечение образования первичных выбитых атомов возрастает, причем новые группы дефектов образуются здесь на более близких расстояниях друг к другу, чем на первом участке пути; когда $E \ll L_B$, то, грубо говоря, на каждом пройденном межуатомном расстоянии образуется один первичный выбитый атом (см. Г-276) и, следовательно в конце пути иона концентрация внедренных атомов и вакансий очень велика. Эта особенность радиационных нарушений была экспериментально найдена Бреттенном и Пирсоном Г-25 и Мейером Г-156. То же относится и к плеохроничным гало, наблюдаемым в слюде; наиболее ясные гало представляют собой области метамиктного вещества Г-1006.

Бомбардировка быстрыми нейтронами обычно должна приводить к образованию нарушений только что указанного типа с очень высокой концентрацией. Когда энергия выбитого атома достаточно мала, то средний свободный пробег между столкновениями, в которых теряется большая часть энергии, приближается к межуатомному расстоянию. При этих условиях модель, основанная на рассмотрении столкновений, показывает, что нарушение будет состоять из области, содержащей очень большую концентрацию вакансий, окруженной областью с большой концентрацией внедренных атомов.

б) «Клинья смещения» и «тепловые клинья». Бринкмен Г-276 считает, что в случае очень высокой концентрации нарушений, возникающих при нейтронной бомбардировке тяжелых элементов, не имеет смысла говорить об отдельных столкновениях, и предполагает, что объем, в котором образуются эти нарушения за небольшой интервал времени, расплавляется, а затем затвердевает в основном с той же кристаллографической ориентацией, как и исходное вещество. Такие области Бринкмен называет «клиньями смещения» (displacement spikes). Размер клина смещения определяется следующим образом. По мере замедления движущегося атома сечение столкновений, приводящих к смещениям, увеличивается. В том месте, где на каждом пройденном межуатомном расстоянии происходит одно столкновение, вся остальная часть энергии движущегося атома распределяется в клине смещения со средней энергией 1 эв на атом.

Средний диаметр клина смещения, образованного нейтронами с энергией 2 Мэв в меди, оцененный таким образом, составляет $\sim 75 \text{ \AA}$; такой клин смещения содержит $2 \cdot 10^4$ атомов.

Бринкмен считает, что основными дефектами, вносимыми такими клиньями, являются небольшие дислоцированные петли и небольшое число внедренных атомов и вакансий, закаленных при затвердевании.

Другое подобное представление, а именно модель «теплового клина» (thermal spike), было предложено Зейтцем Г-196а. Согласно

этому представлению движущаяся частица примерно на 10^{-12} сек нагревает вещество вокруг пути своего пробега сквозь твердое тело. Как и в случае клиньев смещения, последствия быстрого нагревания и охлаждения нельзя предсказать однозначно (см. Г-123а). Экспериментально установлено, что упорядоченный сплав Cu_3Au при нейтронной бомбардировке разупорядочивается быстрее, чем следовало бы ожидать, исходя из числа смещенных атомов, и это согласуется с представлением о клиньях смещения.

Практическое значение этих моделей зависит от предельных значений объема и времени, при которых еще можно применять макроскопические представления о теплопередаче. Частоты атомных колебаний имеют величину порядка 10^{12} — 10^{13} сек $^{-1}$. В течение 10^{-12} сек нарушение решетки распространяется упругими волнами на расстояние 10—50 Å, что примерно соответствует среднему свободному пробегу фононов в изоляторах при комнатной температуре¹⁴. Следовательно, в изоляторах для интервалов времени меньше 10^{-12} сек или для объемов с линейными размерами значительно меньше 50 Å макроскопические законы теплопередачи следует применять с осторожностью.

В металлах, где перенос энергии осуществляется главным образом свободными электронами, упругие нарушения в основном сводятся к возмущению свободных электронов в течение времени около 10^{-13} сек¹⁴. Средний свободный пробег, связанный с переносом энергии свободными электронами, составляет ~ 100 Å или больше и, следовательно, для применения макроскопических законов теплопередачи в металлах требуется, по-видимому, значительно больший объем, чем в изоляторах. Исходя из этих довольно грубых критериев, видно, например, что нарушения, вызванные движущимися в уране продуктами деления, по-видимому, можно рассматривать на основе представления о тепловых клиньях. Осколок с энергией 100 Мэв имеет пробег около $4 \cdot 10^{-4}$ см Г-166; легко показать, что цилиндрический объем радиусом 100 Å, окружающий след такого осколка, при поглощении этой энергии нагреется до 4000° С. Классические выражения для теплопроводности показывают, что температура этого следа уменьшается вдвое примерно в течение 10^{-11} сек. В противоположность этому подобные расчеты показывают, что самым лучшим способом рассмотрения нарушений, вызываемых электронами, γ -лучами и энергичными ($E > L_B$) легкими ионами, является рассмотрение на основе индивидуальных столкновений. Очень возможно, что оба представления следует применять одновременно, так как первичные выбитые атомы обладают всеми энергиями от E_d до E_{max} , причем почти несомненно, что поведение выбитых атомов с малой энергией следует рассматривать на основе представлений о столкновениях. При общих облучениях в реакторе большая часть первичных выбитых атомов имеет сравнительно низкие энергии, что связано с формой

функции распределения энергии быстрых нейтронов*). Берман Г-13 и Клеменс Г-118 в своих исследованиях, проведенных на кварце, показали, что нарушения, вызванные быстрыми нейтронами, можно рассматривать как смесь изолированных внедренных атомов и сравнительно больших объемов со значительными нарушениями.

Та же трудность встретилась при попытках количественного объяснения металлизации; Бредли¹⁶ пришел к выводу, что ни одно из существующих до настоящего времени представлений не дает возможности адекватного объяснения различных опытов. Однако он нашел, что нет никаких фактов, говорящих в пользу представления о «горячих точках» для ионов с энергиями до 1800 эв, бомбардирующих щелочные металлы. Наиболее явно выраженное применение представления о «горячих точках», данное Тоунесом¹⁷, не свободно от возражений, а именно, что макроскопические законы теплопередачи нельзя применять к объемам, содержащим только несколько атомов в течение времени порядка 10^{-16} сек. Кейвелл¹⁸ применил представление о столкновении по типу твердых шаров к рассмотрению распыления серебра и других металлов, вызванного ионами аргона с энергией до 5000 эв, и получил весьма хорошее согласие с данными своих опытов при предположении, что при каждом столкновении иона аргона (при замедлении его до 39 эв) «распыляется» один атом серебра.

4. Эффекты в соединениях

а) Столкновения, приводящие к замещению атомов. При некоторых столкновениях движущихся атомов с неподвижными, приводящих к смещению последних из узлов решетки, остаточная энергия бомбардирующего атома оказывается недостаточной, чтобы этот атом мог удалиться от образовавшейся при этом вакансии. Такие столкновения называются столкновениями, приводящими к замещению атомов (*replacement collisions***), так как они приводят к изменению типа атомов, находящихся в некоторых узлах решетки, но не к изменению общего числа атомов. Очевидно, что столкновения с замещениями имеют очень небольшое значение в одноатомных твердых телах, но оказываются существенными при рассмотрении радиационных эффектов в соединениях.

*) Для реакторов с графитовым замедлителем эта функция, грубо говоря, имеет вид

$$F(E) dE = \frac{k dE}{E},$$

где $F(E) dE$ — поток, k — постоянная (см., например, ¹⁵).

**) В дальнейшем для краткости мы называем такие столкновения «столкновениями с замещениями». — *Прим. перев.*

Кинчин и Пиз предположили (Γ -117a), что столкновения с замещениями происходят тогда, когда энергия бомбардирующего атома после столкновения оказывается меньше, чем E_d , и меньше, чем энергия, переданная первоначально неподвижному атому. Далее принимается, что столкновения с замещениями могут иметь место только, когда энергия, передаваемая неподвижному атому, превышает некоторое пороговое значение E_p . Приближенный расчет величины N_p , числа столкновений с замещениями для случая нейтронной бомбардировки, основанный на рассмотрении столкновений по типу упругих шаров и предположении о равенстве масс атомов в решетке, приводит к уравнению

$$N_p = 0,5 N_d \left[1 + \frac{\ln \frac{E_d}{E_p}}{\ln \frac{4}{3}} \right], \quad (23)$$

где N_d — число смещенных атомов, определяется уравнением (17). Так как E_p должно быть, по-видимому, значительно меньше, чем E_d , то число столкновений с замещениями может превысить число смещений атомов. Это, в частности, относится к случаю упорядоченных сплавов, в которых E_p может быть незначительно больше, чем энергия активации внутренней диффузии (в трещинах, щелях и др.), которая по оценке Хантингтона Γ -996 составляет для меди 0,25 эв.

Если массы атомов в соединении существенно различаются между собой, то число замещений будет значительно меньше, чем вычисленное по уравнению (23), потому что, как легко видеть из уравнения (1), движущийся атом с массой m не может передать больше половины своей энергии атому с массой M_2 , если $\lambda < \frac{1}{2}$. Легко показать, что по предложенному механизму замещения могут иметь место при $\frac{1}{5,83} < \frac{M_1}{M_2} < 5,83$.

б) Разупорядочение. В любом соединении как столкновения с замещениями, так и частичная или полная рекомбинация дефектов Френкеля могут привести к тому, что некоторые атомы оказываются в необычных для них узлах решетки. Хорошо известно, что такой процесс разупорядочения происходит в упорядоченных сплавах Cu_3Au и Ni_3Mn . В отношении других веществ имеется мало экспериментальных доказательств существования этого процесса. В частности, в случае нитрида бора даже при очень больших дозах разупорядочение не было обнаружено Γ -171. Даже в таком случае облучение должно привести к образованию некоторого количества дефектов, в которых смещенный атом находится в несоответствующем вакантном узле или очень близко к такому узлу. Такие дефекты могут иметь значение в минералах, так как последние часто содержат атомы многих различных элементов.

II. ВОССТАНОВЛЕНИЕ ДЕФЕКТОВ

В большинстве случаев при повышении температуры образца после облучения физические свойства возвращаются к своим первоначальным значениям. Кроме того, происходит выделение энергии. В небольшом числе случаев после очень сильного облучения отжиг при высоких температурах может привести к рекристаллизации вещества с образованием новой фазы со структурой, отличающейся от структуры исходной фазы, что, например, имеет место в случае торита¹⁹ и некоторых форм кварца^{Г-224}. Обычно следует ожидать, что некоторое восстановление дефектов происходит также и в процессе облучения, даже если облучение проводится при сколь угодно низкой температуре.

Восстановление в результате нагревания обычно происходит в несколько стадий с различными значениями энергии активации в различных температурных интервалах, и ход процесса восстановления обычно может быть описан уравнением

$$\frac{dn}{dt} = -cn^{\gamma} \exp\left(-\frac{\varepsilon}{kT}\right), \quad (24)$$

где n — число дефектов, принимающих участие в процессе восстановления; ε — энергия активации; c — постоянная; γ — часто называют «порядком реакции» по аналогии с газовыми химическими реакциями. Однако следует указать, что этот термин может иногда ввести в заблуждение, так как скорость некоторых процессов восстановления определяется диффузией дефектов в решетке, что приводит к кажущимся высоким порядкам реакции, не соответствующим фактическому числу компонентов, участвующих в процессе, как это имеет место в химических реакциях.

1. Рекомбинация внедренных атомов и вакансий

а) Пары внедренных атомов и вакансий, находящихся близко друг к другу. Рекомбинация пар «внедренный атом — вакансия» рассмотрена Флетчером и Брауном^{Г-74}. Эти авторы предположили, что вакансии являются более подвижными дефектами, и применили уравнения диффузии к процессу беспорядочной миграции вакансий к сферическим «ловушкам», представляющим собой внедренные атомы. Если $n(0)$ вакансий начинают двигаться на расстоянии b от такой ловушки с радиусом a в бесконечной изотропной трехмерной среде, то число $n(t)$ вакансий, сохраняющихся к моменту времени t , определяется уравнением

$$n(t) = n(0) \cdot \left\{ 1 - \frac{a}{b} + \frac{a}{b} \Phi\left(\frac{b-a}{2(Dt)^{1/2}}\right) \right\}, \quad (25)$$

где D — коэффициент диффузии вакансий. Доля $1 - \frac{a}{b}$ вакансий не захватывается ловушкой, но остается «свободной» и может бесконечно диффундировать в веществе. На ранних стадиях этого процесса «освобождения вакансий» решетку нельзя рассматривать как континуум; ввиду этого Флетчер и Браун пользовались численными решениями, применимыми к решетке алмаза.

Для веществ со слоистой структурой, в которых диффузия внедренных атомов *) может происходить только в двух направлениях, сферическая ловушка, используемая при решении трехмерной задачи, заменяется двумерной круговой ловушкой. Решение имеет вид

$$n(t) = n(0) \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{e^{-y^2 Dt}}{y} \left\{ \frac{Y_0(by) J_0(ay) - Y_0(ay) J_0(by)}{J_0^2(ay) + Y_0^2(ay)} \right\} dy, \quad (26)$$

где J_0 и Y_0 — функции Бесселя нулевого порядка. Спинни**) произвел расчет по уравнению (26); некоторые результаты этого расчета приведены на рис. 3. В этом случае «освобождения» внедренных атомов не происходит. Уравнение (24) при $\gamma = 6$ хорошо аппроксимирует уравнение (26).

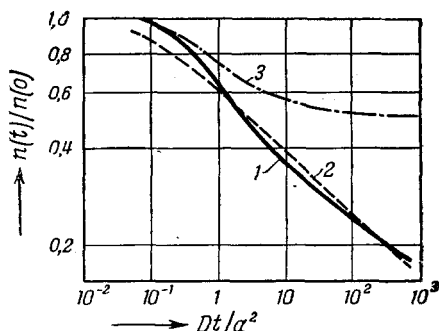


Рис. 3. Отжиг пар атомов внедрения и вакансий, расположенных близко друг к другу.

б) Беспорядочное распределение внедренных атомов и вакансий. Процесс взаимодействия равных количеств беспорядочно распределенных внедренных атомов и вакансий описывается кинетическим уравнением реакции второго порядка, а именно:

$$\frac{dn}{dt} = cn^2 e^{-\frac{\epsilon}{kT}}, \quad (27)$$

где ϵ — энергия активации миграции внедренных атомов.

Если энергия электронов, бомбардирующих вещество, лишь незначительно превышает пороговую энергию, так что образуются изолированные дефекты Френкеля, то можно ожидать, что восстановление дефектов будет происходить в две стадии. Первая стадия описывается уравнением (25) или (26), а вторая — уравнением (27) с одинаковой энергией активации. Явление усложняется вследствие

*) В дальнейшем мы предполагаем, что внедренные атомы являются более подвижными, чем вакансии.

**) Spillney К. Т. (неопубликованные данные).

наличия взаимодействия между внедренными атомами и вакансиями, рассмотренного в работах Г-151 и Г-1656. Авторы этих исследований пришли к выводу, что напряжения решетки вблизи вакансии уменьшают энергию активации миграции внедренного атома, находящегося недалеко от вакансии, и при этих условиях диффузия будет неизотропной. Однако при кратковременных облучениях энергия активации должна возрасть в процессе выделения энергии до значения, соответствующего энергии активации миграции в решетке, не имеющей нарушений, и вторая стадия отжига дефектов должна описываться уравнением (27). Динес Г-56д обратил внимание на то, что сравнительно небольшие изменения энергии активации оказывают значительное влияние на кажущийся порядок реакции.

2. Дополнительные процессы

Изложенное выше рассмотрение процесса рекомбинации оказывается слишком простым для того, чтобы объяснить все наблюдаемые эффекты. Маркс и др. Г-151 описали ряд других возможных процессов. Во время отжига некоторые внедренные атомы могут оказаться захваченными дислокациями или границами зерен, что должно оказать влияние на процесс рекомбинации внедренных атомов и вакансий. Кроме того, после исчезновения всех внедренных атомов избыток вакансий диффундирует по направлению к дислокациям и границам зерен с большей энергией активации. Приближенные решения диффузионных задач, связанных с рассматриваемым процессом, были даны Флетчером и Брауном Г-74 и Бринкменом и др. Г-286. Кроме того, могут образовываться группы внедренных атомов и вакансий, диссоциирующих с высокими энергиями активации.

Таким образом, хотя экспериментальные работы по изучению кинетики восстановления дефектов могут дать ценные сведения, они все же недостаточны для того, чтобы однозначно идентифицировать происходящие при этом процессы. Более полные данные о процессах восстановления можно получить на основе экспериментального измерения энергии активации, имеющей постоянное значение при сравнительно больших изменениях измеряемого физического свойства. Эти значения энергии активации можно сопоставить с оценками, полученными из других экспериментальных данных (например, из опытов по холодной обработке, закалке или самодиффузии) и на основе теоретических расчетов.

3. Накопление нарушений

Рассмотрим теперь случай, когда облучение и отжиг происходят одновременно. Вообще говоря, при облучении образуются группы смещенных атомов и вакансии. При условии, что внедрен-

ные атомы диффундируют на небольшие расстояния сравнительно с расстояниями между этими группами, каждая группа будет отжигаться независимо от других групп. Следовательно, если при облучении мгновенно образовалось dx смещенных атомов, то через интервал времени t при температуре T , останется только $dx F(T, t)$, где $F(T, t)$ — функция, не зависящая от x , которую можно найти экспериментально путем отжига после облучения при очень низких температурах. Таким образом, в момент времени t общее число атомов, смещенных в процессе облучения, в котором эти атомы образуются со скоростью $\frac{dx}{dt'}$, определится уравнением

$$n(t) = \int_0^t \left(\frac{dx}{dt'} \right) F(T, t - t') dt'. \quad (28)$$

Если $\frac{dx}{dt}$ постоянно во время облучения, то уравнение (28) показывает, что число смещенных атомов, имеющих после облучения в течение определенного интервала времени, пропорционально потоку бомбардирующих частиц. Кроме того, из этого уравнения видно, что для различных потоков число смещенных атомов определяется не только интегральной дозой.

Если отжиг групп дефектов можно эмпирически выразить уравнением (24) при $\gamma > 1$ и при постоянной энергии активации, то функция $F(T, t)$ принимает вид

$$\left[1 + c't \exp \left(-\frac{\varepsilon}{kT} \right) \right]^{1/\gamma-1},$$

где c' — новая постоянная.

Для $\gamma > 2$ число смещенных атомов, имеющих после облучения длительного по сравнению с $\left(\frac{1}{c'} \right) \exp \left(\frac{\varepsilon}{kT} \right)$, приближенно определяется уравнением

$$n(t) \approx \frac{dx}{dt} \frac{\gamma-1}{\gamma-2} \left\{ \frac{1}{c'} \exp \left(\frac{\varepsilon}{kT} \right) \right\}^{\frac{1}{\gamma-1}} t^{\frac{\gamma-2}{\gamma-1}}. \quad (29)$$

Для больших значений γ нарушение почти пропорционально x и эффект одновременно происходящего процесса восстановления заключается лишь в уменьшении кажущейся скорости образования смещений пропорционально множителю

$$\left\{ \frac{1}{c'} \exp \left(\frac{\varepsilon}{kT} \right) \right\}^{\frac{1}{\gamma-1}}.$$

Такая температурная зависимость скорости накопления нарушений не должна была бы иметь места при небольших дозах, если бы внедренные атомы и вакансии были распределены беспорядочно. Однако эта зависимость часто наблюдается (см., например, Γ^{151}).

4. Насыщение

В уравнении (29) нет члена, который указывал бы на наличие какого-либо насыщения. Это объясняется тем, что мы пренебрегли взаимодействием между различными группами смещенных атомов. Фактически в процессе облучения эти группы будут иногда перекрываться и при более низких температурах, когда внедренные

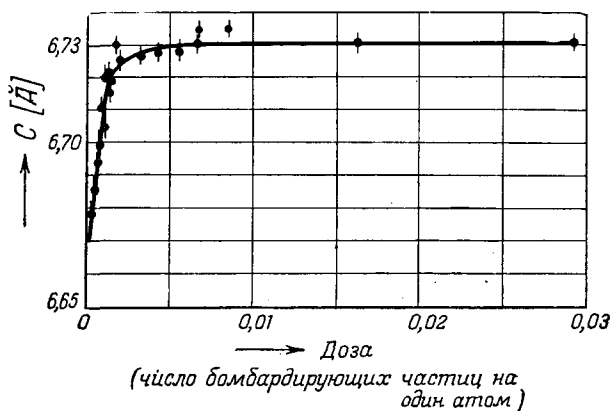


Рис. 4. Насыщение изменения межплоскостного расстояния в нитриде бора. Нитрид бора имеет слоистую решетку и межплоскостное расстояние c вдвое больше расстояния между слоями атомов. Дозы выражены числом бомбардирующих частиц (α -частиц или ядер лития), приходящихся на один атом Γ^{171} .

атомы неподвижны, а это приведет к экспоненциальному насыщению числа смещенных атомов. При более высоких температурах приближение к насыщению будет описываться как процесс восстановления второго порядка.

Довольно близкие представления следуют из другого приближения, использованного Пизом Γ^{171} при изучении эффектов насыщения в нитриде бора (рис. 4). Здесь использовано предположение, согласно которому внедренные атомы и вакансии устойчивы, если расстояние между ними превышает некоторую критическую величину, и что при меньших расстояниях они мгновенно соединяются. Таким образом, каждый внедренный атом окружен Q узлами решетки, в которые он может немедленно перейти, как

только один из них окажется свободным. Статистические соображения приводят к уравнению

$$y = \frac{1}{Q} \ln [2 - e^{-pQ}], \quad (30)$$

в котором y — концентрация внедренных атомов; p — среднее число столкновений каждого атома с узлами, занятыми внедренными атомами.

Это уравнение показывает, что при низких дозах $y = p$, и при дозе, соответствующей $p \approx \frac{1}{Q}$, устанавливается насыщение с концентрацией внедренных атомов $y = \frac{\ln 2}{Q}$. Влияние температуры облучения в этой модели вводится путем предположения, что Q зависит от температуры и что p , следовательно, тоже зависит от температуры, потому что в процессе бомбардировки внедренные атомы и вакансии объединяются в группы. Даже при самых низких температурах Q едва ли может быть меньше числа узлов решетки, являющихся ближайшими соседями к междоузлию, занимаемому внедренным атомом, и следовательно, максимальная концентрация внедренных атомов в кристаллическом веществе вряд ли может быть значительно больше 5%.

5. Радиационный отжиг

Иногда наблюдаются эффекты, которые показывают, что процессы восстановления ускоряются самим излучением. Например, Купер и др. Γ -46a наблюдали, что скорость увеличения сопротивления меди, серебра и золота при 12° K в процессе облучения уменьшается, в то время как после облучения при этой температуре не наблюдалось никакого отжига. Один очевидный механизм для объяснения этого состоит в предположении о местном нагреве, производимом бомбардирующим излучением. Однако, по-видимому (см. Γ -123a), в большинстве случаев длительность нагрева слишком мала, чтобы вызвать заметный отжиг. Кёлер и Зейтц Γ -123a полагают, что возбуждение электронов облегчает перемещение внедренных атомов или вакансий. Возможно также, что столкновения приводят к некоторым перемещениям вакансий и внедренных атомов. Пороговая энергия для таких перемещений значительно ниже 25 эв, требующихся для смещений, и следовательно, вероятность перемещения внедренного атома или вакансии значительно больше, чем вероятность образования такого дефекта вновь. Таким образом, облучение может приводить к перемещениям, которые велики сравнительно с перемещениями; активируемыми тепловыми колебаниями, и приводить, следовательно, к некоторому восстановлению дефектов, которого не было бы при отсутствии излучения. Такой процесс может заметно уменьшить концентрацию насыщения сме-

щенных атомов, приведенную в предыдущем параграфе. Такое насыщение может иметь значение для ограничения концентрации смещенных атомов в группах, образующихся при бомбардировке быстрыми нейтронами (§ 1, з).

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. G. K. Werner, *Phys. Rev.* **93**, 633 (1954).
 2. H. A. C. McKay, *Progr. Nucl. Phys.* **1**, 168 (1950).
 3. N. Bohr, *K. Danske Vidensk. Selsk. Mat. Fys. Medd.* **18**, 8 (1948).
 4. E. I. Williams, *Rev. Mod. Phys.* **17**, 217 (1945).
 5. I. Knipp, E. Teller, *Phys. Rev.* **59**, 659 (1941).
 6. T. S. Moss, *Photoconductivity in the Elements* (London, Butterworths Scientific Publications), 1952, стр. 105.
 7. E. G. Schneider, H. M. O'Bryan, *Phys. Rev.* **51**, 293 (1937).
 8. H. A. Bethe, I. Ashkin, *Experim. Nucl. Physics* **1**, 166 (1953), под ред. E. Segre (New York, Wiley).
 9. S. K. Allison, S. D. Warshaw, *Rev. Mod. Phys.* **25**, 779 (1953).
 10. B. E. Watt, *Phys. Rev.* **87**, 1037 (1952).
 11. M. Burton, *J. Phys. Chem.* **51**, 611 (1947).
 12. N. F. Mott, *Proc. Roy. Soc. A* **124**, 425 (1929); *Ibid.* **135**, 429 (1932).
 13. W. A. McKinley, H. Feshbach, *Phys. Rev.* **74**, 1759 (1948).
 14. C. Kittel, *Introduction to Solid State Physics*, New York, Wiley, 1953.
 15. B. T. Taylor, AERE Report № N/R 1005, 1952.
 16. R. C. Bradley, *Phys. Rev.* **93**, 719 (1954).
 17. C. H. Townes, *Phys. Rev.* **65**, 319 (1944).
 18. F. Keywell, *Phys. Rev.* **87**, 161 (1952).
 19. A. Pabst, *Amer. Min.* **37**, 137 (1952).
-