

КАСКАДЫ АТОМНЫХ СМЕЩЕНИЙ В ТВЕРДЫХ ТЕЛАХ. ДИНАМИЧЕСКАЯ СТАДИЯ

И. М. Дремин^a, О. В. Иванов^{a*}, В. А. Нечитайло^a,
Н. М. Соболевский^b, А. В. Субботин^c, В. П. Шевелько^a

^a Физический институт им. П. Н. Лебедева Российской академии наук
119991, Москва, Россия

^b Институт ядерных исследований Российской академии наук
117312, Москва, Россия

^c Научно-исследовательский и конструкторский институт электротехники им. Н. А. Доллежалея
101000, Москва, Россия

Поступила в редакцию 9 июня 2003 г.

Изучена эволюция каскадов атомных смещений в твердых телах. Рассчитаны сечения процессов перезарядки, ионизации и упругого рассеяния атомов и ионов, участвующих в развитии каскада атомных смещений в веществе. Проведен учет эффекта плотности среды. Полученные результаты позволили впервые провести монте-карловский расчет количественных характеристик каскада, основанный на знании свойств этих микроскопических процессов без использования феноменологических потенциалов. Отличительной новой чертой предлагаемого подхода является *ab initio*-расчет детальных сведений об атом-атомных процессах и их практическое применение к анализу каскадов атомных смещений. Описан процесс суб-каскадирования и найдена связь числа пар Френкеля с энергией первично выбитого атома в широком энергетическом интервале. Это позволяет в дальнейшем определить зависимость процесса упрочнения корпусных сталей реакторов от дозы облучения и провести сравнение первичного радиационного воздействия для реакторов деления и синтеза.

PACS: 28.41.Ak, 28.52.Av, 31.15.Ar, 34.50.-s, 61.80.Az

1. ВВЕДЕНИЕ

Проблема прохождения атомных частиц через вещество имеет давнюю историю (см., например, [1–3]). Понимание физических основ протекающих процессов и теоретический расчет их последствий представляют несомненный практический интерес прежде всего с точки зрения возможности прогнозирования работоспособности конструкционных материалов ядерной энергетики. Сейчас стало возможным провести более детальное рассмотрение. Это обусловлено прогрессом в компьютерных расчетах. Во-первых, удалось рассчитать сечения атом-атомных соударений исходя из первых принципов и использовать их для моделирования каскадов атомных смещений в твердых

телах. Во-вторых, можно применить новые подходы к численному решению трехмерных уравнений теплопроводности и переноса вещества, связанные с вейвлет-анализом, и таким образом изучить термодинамическую стадию процесса каскадирования. В данной работе мы рассмотрим динамическую стадию процесса развития каскада атомных смещений в железе. Последующая термодинамическая стадия изучена в [4]. В нашем рассмотрении мы будем иметь в виду металлы, облучаемые нейтронами с энергией, достаточной для повреждения кристаллической структуры. Подобный подход, как будет видно из дальнейшего, включает как частный случай и облучение высокоэнергетичными ионами.

Радиационное воздействие в самых общих чертах представляет собой цепь событий, начинающихся с взаимодействия нейтрона с ядром атома твер-

*E-mail: ivanov@lpi.ru

дого тела, приводящего к образованию первично выбитого атома, развития цепочки атом-атомных взаимодействий (каскад), в результате чего образуются области с линейными размерами от десятков до сотен ангстрем с повышенными энерговыделением (термопик) и концентрацией пар Френкеля — атомов, выбитых из регулярных положений (межузельные атомы), и вакантных решеточных узлов (вакансии) [5–8]. Диффузионное расплывание как тех, так и других, обусловленное повышенной температурой в термопике, а также градиентом химического потенциала самих точечных дефектов, приводит к формированию в твердом теле пересыщенного двухкомпонентного раствора междуузельных атомов и вакансий. Его дальнейший распад инициирует эволюцию элементов микроstructures, проявляющуюся в образовании, росте и переползании дислокационных петель различных типов и элементов дислокационной структуры, зарождении и росте трехмерных вакансионных образований (пор), «растворении» старых и образовании новых ансамблей мелкодисперсных фазовых выделений, диффузионном переносе легирующих и примесных атомов с образованием дислокационных «атмосфер» и «сегрегаций» по границам зерен и т. д. Эволюция микроstructures, в свою очередь, приводит к радиационно-индуцированным макроскопическим эффектам, таким как изменения электро- и теплопроводности, объема, механических свойств, радиационный рост и т. д.

При повышенных температурах ($T \geq 0.4T_m$, где T_m — температура плавления) в основе радиационно-индуцированных эффектов лежит именно распад пересыщенного твердого раствора. Хорошо известно, что описание подобных эффектов основывается на уравнениях для скоростей реакций [9–13]. Кроме констант, определяемых структурой и свойствами самого твердого тела и точечных дефектов, необходимо задать «источники», т. е. вычислить скорости генерации точечных дефектов и их общее количество (определяемые дозой и энергетическим спектром нейтронов).

К настоящему времени существует обширная литература, посвященная развитию каскадов в твердых телах [14–19]. При этом, особенно в последнее время, основное внимание уделяется определению числа «выживших» после динамической (баллистической) стадии и спонтанной рекомбинации пар Френкеля и их кластеров, могущих дать вклад в образование пересыщенного твердого раствора. В рамках модели молекулярной динамики, не рассматривающей процессы ионизации атомов и захвата элект-

тронов ионами, разыграны каскады с энергией первично выбитого атома до 60 кэВ в твердом теле с учетом кристаллической структуры [18, 20].

Однако существуют радиационно-индуцированные эффекты, проявляющиеся при температурах около $0.3T_m$, в основе которых лежат совершенно иные механизмы. Одним из таких эффектов является радиационное упрочнение стали корпусов реакторов типа ВВЭР, подвергающейся облучению нейтронами при температурах около $0.3T_m$. Радиационно-индуцированное развитие ансамбля фазовых выделений, приводящих к упрочнению стали, инициируется субкаскадами определенного размера. В связи с этим описание процесса субкаскадирования (разделения каскада на ряд меньших самостоятельных каскадов, каждый из которых обладает определенными параметрами) и последующей эволюции отдельно взятого субкаскада на термодинамической стадии становится необходимым для понимания как процесса зарождения фазовой частицы, так и кинетики процесса упрочнения в зависимости от дозы и энергетического спектра нейтронного облучения.

Таким образом, в данной работе процессы развития каскадов рассматриваются в основном с целью описания субкаскадирования и определения параметров субкаскадов в широком интервале энергий первично выбитых атомов, для чего достаточно рассмотрения в приближении аморфной среды. Исследование ведется, начиная со стадии образования первично выбитых атомов, что позволяет описывать развитыми методами и ионное облучение.

2. ОБЩИЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЯ О РАЗВИТИИ КАСКАДОВ

Развитие каскадов в веществе, вызванных бомбардировкой его частицами с относительно высокой энергией, достаточной для выбивания атомов вещества с занимаемых ими мест, является эффектом, представляющим интерес как для понимания протекающих при этом физических процессов, так и в практических приложениях. После того как начальная частица выбивает один из атомов вещества, этот атом с достаточно высокой энергией, двигаясь в среде, сталкивается с атомом среды и, в свою очередь, выбивает его из занимаемого положения. При небольшой передаче энергии вновь выбитый атом может либо просто возбудиться и затем перейти в основное состояние, либо остановиться из-за потерь энергии. В обоих случаях энергия переходит в нагрев среды за счет испускания и поглощения фо-

нонов. При более высокой передаче энергии новый атом может инициировать еще одну ветвь каскада. Процесс повторяется, и в результате каскад разветвляется наподобие дерева. Места, откуда были выбиты атомы, называются вакансиями, а сами атомы после их остановки — междуузлиями. Они образуются парами, которые принято называть парами Френкеля. При развитии каскада заряды налетающего и покоящегося атомов могут измениться за счет ионизации или захвата электронов.

Все эти процессы определяются свойствами лагранжиана электромагнитных взаимодействий. Одним из важнейших свойств любой теории с безразмерной константой связи, включая электродинамику, является доминирование процессов со сравнительно малыми передачами энергии (инфракрасная расходимость при безмассовых фотонах, обрезаемая формфакторами). Этим определяется относительная роль (и частота проявления) описанных выше процессов. Поэтому можно ожидать (и это будет подтверждено расчетами), что развитие каскадов происходит следующим образом: первично выбитый атом движется сначала практически прямолинейно в среде, тратя небольшие порции энергии, и лишь в более редких случаях испытывает заметные отклонения, когда выбивает новый атом с большой энергией, который начинает еще одну ветвь каскада. Разветвленность «дерева» определяется начальной энергией и относительной ролью процессов в данной среде. В конечном итоге, когда баллистическая стадия развития каскада завершается, вся начальная энергия превращается в тепло внутри среды. В местах интенсивного выделения энергии могут происходить фазовые переходы.

Таким образом, для описания развития каскада атомных смещений в веществе и вызываемых им последствий необходимо знать

1) на начальном этапе — свойства (параметры) процесса выбивания первичного атома начальной частицей при разных ее энергиях;

2) на баллистическом этапе — количественные характеристики взаимодействий атомов и ионов при разных энергиях начального атома (иона), проходящего в среде (т. е. потенциалы взаимодействия, свойства перезарядки атомов и ионов, эффекты плотности среды и т. п.);

3) на термодинамической стадии — тепловую и структурную эволюцию процесса в трехмерном пространстве и инициирование зарождения фазовых частиц при определенных условиях.

Эти три этапа разделены по временам их протекания. Первый этап — образование первично вы-

битого атома при ударе по покоящемуся атому нейтроном — характеризуется очень малыми ядерными временами порядка 10^{-23} – 10^{-20} с. Атомные столкновения и рекомбинация пар на баллистическом этапе происходят за времена порядка 10^{-16} – 10^{-13} с. Тепловые эффекты определяют основную длительность протекания процесса (порядка 10^{-10} с при наличии энтропии фазового перехода).

Здесь рассмотрены два первых этапа. Они объединены в единую динамическую стадию, поскольку это тот момент развития процесса, которым определяются динамические свойства каскадов атомных смещений в железе, вызываемых облучением нейтронами. Рассмотрен процесс выбивания первичных атомов начальным нейтроном. Вычислены сечения атом-атомных и атом-ионных столкновений. Проведен монте-карловский розыгрыш каскадов с использованием характеристик таких столкновений. В результате определены основные параметры, характеризующие места скопления остановившихся атомов, т. е. областей наибольшего выделения энергии.

Отличительной чертой предлагаемого подхода является *ab initio*-расчет детальных сведений об атом-атомных и атом-ионных процессах и их практическое применение к расчету, описанию и анализу каскадов атомных смещений.

3. МЕТОД РАСЧЕТА КАСКАДОВ АТОМНЫХ СМЕЩЕНИЙ

Для последовательного изложения метода расчета каскада атомных смещений в веществе рассмотрим подробнее описанную выше динамическую стадию развития каскада.

1. Начнем с вопроса о первичном процессе выбивания атома железа нейтроном. Этот процесс протекает за счет ядерных взаимодействий нейтрона с атомным ядром. Он носит характер внезапного возмущения и потому может быть рассчитан.

В нерелятивистском случае максимальная кинетическая энергия E_{max} , которую атом получает при ударе по нему нейтроном с кинетической энергией E_n , достигается, когда атом летит в направлении первичного нейтрона. Она равна

$$E_{max} = \frac{4}{A+2} E_n, \quad (1)$$

где A — массовое число, $A \approx 56$ для железа. Значит, кинетическая энергия выбиваемого атома железа по крайней мере в 14.5 раз меньше энергии нейтрона. Заметим, что при сравнительно низких энергиях угловое распределение рассеянных нейтронов изотропно в системе центра масс, а угол θ вы-

лета атома в лабораторной системе не превышает 90° . Тогда энергию атома можно определить, просто умножив правую часть формулы (1) на $\cos^2 \theta$. В результате средняя энергия атома будет в 29 раз меньше энергии нейтрона. Таким образом, энергетический спектр атомов железа оказывается намного мягче нейтронного спектра.

Энергии подавляющего числа нейтронов в энергетических ядерных реакторах не превышают 10 МэВ. Покажем, что при таких энергиях первично выбитый атом вылетает неионизованным. Энергия электронов на внешней $4s^2$ -оболочке атома железа равна 7.8 эВ. Как нетрудно показать, выбивание электронов с внешней $4s^2$ -оболочки не может происходить при энергиях нейтронов вплоть до 11.6 МэВ. Эта оценка получается из условия равенства скоростей электрона на орбите и вылетающего атома, которое возникает при рассмотрении внезапных возмущений [21–23]. Квадрат скорости электрона при энергии около 7.8 эВ равен примерно $3 \cdot 10^{-5} c^2$, а энергия атома железа с такой скоростью равна примерно 800 кэВ (больше энергии электрона в m_a/m_e раз, где m_a и m_e — массы атома и электрона). С учетом пересчета энергии нейтрона по формуле (1) получается приведенное выше значение для минимальной энергии нейтрона. Для вылета атома под ненулевым углом потребуются еще более высокие энергии (множитель $\cos^{-2} \theta$). Энергия электронов на следующей $3d^6$ -оболочке составляет 9.0 эВ. Соответствующий нижний предел энергии нейтрона, необходимой для выбивания электронов с $3d^6$ -оболочки, равен 13.6 МэВ. Однако даже при более высоких энергиях вероятность ионизации атома все еще мала. При малых скоростях v_A ядра ее можно оценить [21] по порядку величины как

$$W \approx v_A^2/c^2 \ll 1. \quad (2)$$

По модели Томаса–Ферми можно рассчитать полную энергию ионизации атома, т. е. энергию E_e , необходимую для удаления всех электронов из нейтрального атома [24]. С учетом эмпирических данных наиболее точная оценка дает $E_e = 16Z^{7/3} = 32$ кэВ. Это очень большая энергия по сравнению с энергиями электронов на внешних оболочках. Из проведенных оценок следует, что первичные ионы с $Z = 26$ (полностью ионизованный атом железа), сечение рассеяния которых использовалось в работе [25] при изучении каскадов, уж тем более не играют роли в нашей задаче.

Таким образом, при энергиях нейтронов меньше 10–20 МэВ дальнейший процесс развития каскада

наверняка инициируется неионизованными первично выбитыми атомами.

2. Баллистический этап развития каскада определяется фактически четырьмя процессами: упругим рассеянием атомов (ионов), не меняющим зарядовых состояний сталкивающихся партнеров (при этом, конечно, затрачивается энергия на выбивание атома из решетки); ионизацией налетающего атома (иона) покоящимся атомом, в результате чего получается ион с более высоким зарядом; захватом налетающим ионом электронов, что приводит к уменьшению заряда этого иона; потерей энергии на ионизацию покоившегося вначале атома. Первый и последний процессы не меняют заряда налетающего атома, но, конечно, приводят к потере энергии, и их необходимо учитывать. Процессы ионизации и захвата электрона изменяют заряд налетающего атома (иона).

Сечения всех этих процессов были вычислены нами впервые с использованием результатов из [26–32]. Принципиальная новизна предлагаемого метода состоит в том, что для расчетов сечений были применены основополагающие принципы теории с использованием функционала плотности, а не феноменологические подгонки потенциалов. Кроме того, помимо чисто упругого рассеяния учитывались и процессы с изменением зарядов сталкивающихся партнеров. Эти процессы оказываются исключительно важными для последующих выводов о развитии каскадов. Краткое изложение проведенных расчетов содержится в Приложениях 1 и 2. Этих сведений уже достаточно для разработки монте-карловской схемы расчета каскада, при изложении которой мы более детально рассмотрим относительную роль разных процессов в развитии каскадов согласно вычисленным сечениям.

Моделирование каскада проводилось в приближении оптической толщины для аморфной среды (см., например, [25, 33]) с учетом полученных величин сечений. Оптическая толщина вещества для атома (или иона с зарядом Z) с энергией E , отвечающая указанным выше процессам, определяется следующим образом:

$$O_n(Z, E) = \int_0^E \rho \sigma_n(Z, E') \left(\frac{dE'}{dR} \right)^{-1} dE', \quad (3)$$

где ρ — плотность вещества, σ_n — сечения упругого рассеяния ($n = el$), ионизации ($n = ip$) и захвата электрона ($n = ep$) налетающим ионом (projectile). Его тормозная способность записывается следующим образом:

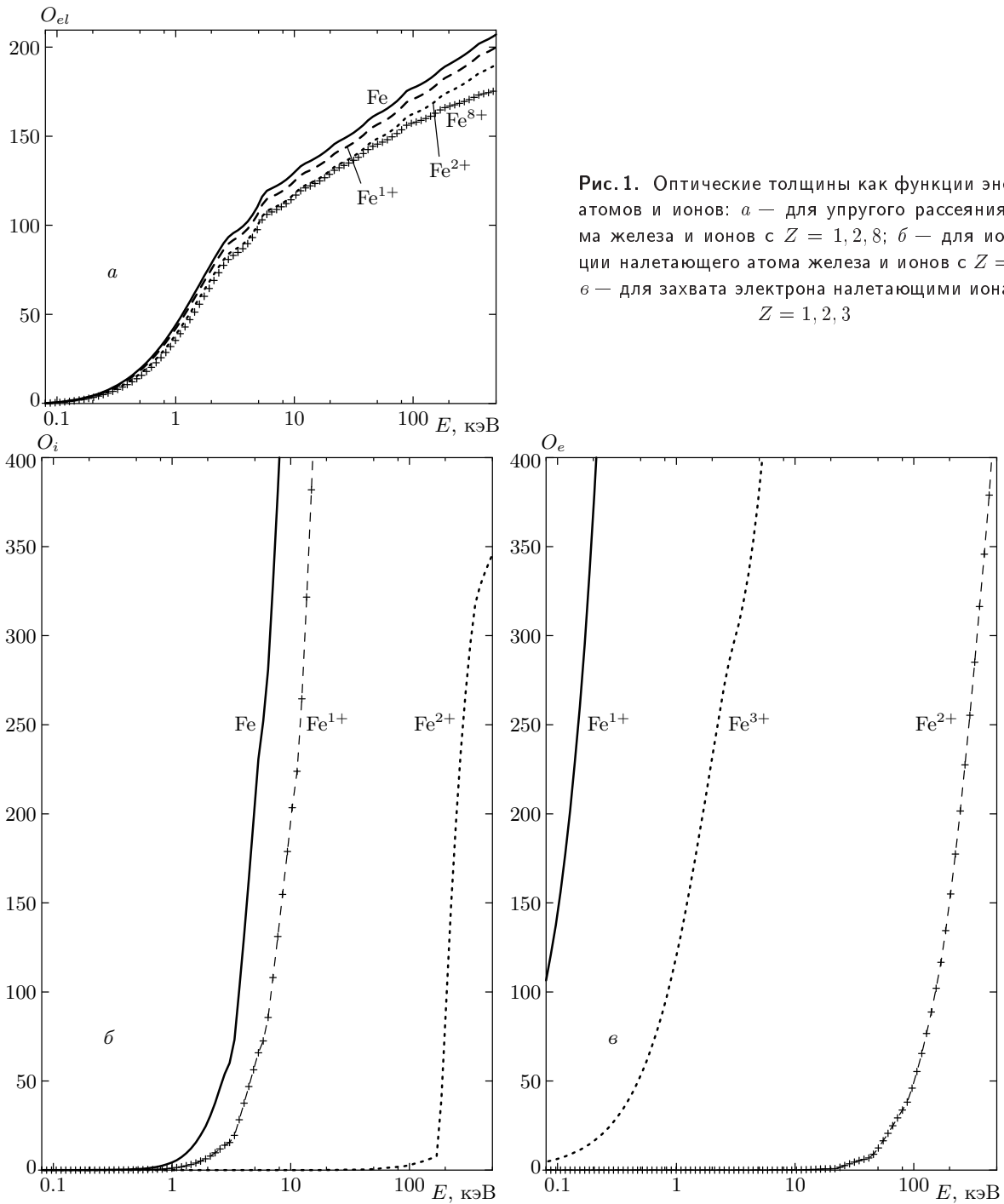


Рис. 1. Оптические толщины как функции энергии атомов и ионов: *a* — для упругого рассеяния атома железа и ионов с $Z = 1, 2, 8$; *b* — для ионизации налетающего атома железа и ионов с $Z = 1, 2$; *c* — для захвата электрона налетающими ионами с $Z = 1, 2, 3$

$$\frac{dE}{dR} = 2I\rho\sigma_{it}(Z, E) + \rho E \int_0^{\theta_c} \sin^2 \frac{\theta}{2} \sigma_{el}(Z, E, \theta) d\theta, \quad (4)$$

где I — потенциал ионизации среды, σ_{it} — сечение ионизации атома среды (target), $\sigma_{el}(Z, E, \theta)$ — дифференциальное сечение упругого рассеяния. Инте-

грирование ведется до угла θ_c , определяемого минимальной потерей энергии, необходимой для образования пары Френкеля. Она принималась равной стандартному [34] среднему значению пороговой энергии смещения атома, $E_d \approx 40$ эВ, которая связана с углом θ_c кинематическим соотношением [2]

$$E_d = E \sin^2(\theta_c/2).$$

Первое слагаемое в формуле (4) отвечает за ионизацию и электронные возбуждения среды (они дают одинаковый вклад, поэтому возникает множитель 2), а второе — за фоновые возбуждения. Соответственно, полное сечение упругого рассеяния, ответственное за каскадирование и появляющееся в формуле (3), связано с дифференциальным сечением формулой

$$\sigma_{el}(Z, E) = \int_{\theta_c}^{\pi} \sigma_{el}(Z, E, \theta) d\theta. \quad (5)$$

Моделирование каскада начинается с определения оптических толщин для трех возможных процессов превращения иона (для двух в случае атома) с начальной энергией E в соответствии с выписанными выше формулами. Значения сечений процессов при заданной энергии подставляются согласно результатам расчетов, приведенным в Приложениях.

На рис. 1а показаны оптические толщины для упругого рассеяния атома Fe и ионов ($Z = 1, 2, 8$) в зависимости от энергии. Естественно, наибольшая толщина отвечает рассеянию нейтральных атомов. Она уменьшается с ростом заряда иона, особенно сильно¹⁾ при переходе к иону Fe⁸⁺, что отвечает исчезновению валентных оболочек.

На рис. 1б приводятся оптические толщины для ионизации налетающего атома Fe и ионов ($Z = 1, 2$) как функции энергии. Заметно резкое уменьшение оптических толщин для ионов по сравнению с атомом. Из сравнения рис. 1а и 1б видно, что упругое рассеяние доминирует при энергиях менее примерно 2 кэВ, т. е. процессы с изменением заряда менее важны при столь малых энергиях, но их все же необходимо учитывать.

На рис. 1в изображены оптические толщины для захвата электрона налетающими ионами ($Z = 1, 2, 3$) в зависимости от энергии. Они характеризуются существенно немонотонной зависимостью от заряда. Из рис. 1б и 1в видно, что ионы Fe²⁺ обладают большой длиной пробега без изменения заряда.

Используя кривые зависимости $O_n(E)$, проводим розыгрыш случайных длин пробега, при которых атом или ион упруго рассеивается или ионизуется

¹⁾ Следует учитывать, что оптическая толщина стоит в показателе экспоненты в выражении для длины пробега. Поэтому даже ее небольшие изменения существенно сказываются на длине пробега.

либо ион захватывает электрон. Длины пробега для всех этих процессов разыгрываются численно в соответствии с известным монте-карловским методом обратных функций [25, 33]. При розыгрыше конкретного каскада определяется энергия в каждом из них и выбирается наибольшая (ближайшая к E). Соответствующий процесс называется событием. Так фиксируется новая энергия E' атома (иона). Определяются пространственные координаты этого события с использованием формулы (4). Дальнейший розыгрыш идет по той же итеративной схеме, если просто произошло изменение заряда (конечно, с выбором соответствующих оптических толщин для ионов). При упругом рассеянии определяется угол рассеяния и розыгрыш идет для каждого из партнеров.

Соотношение между вероятностями протекания этих процессов определяется разницей в их сечениях и кинематических характеристиках. Поскольку сечения упругого рассеяния обычно оказываются меньше сечений неупругого рассеяния (см. Приложения), атом или ион на своем пути основную энергию понемногу тратит на возбуждение среды и перезарядку и реже на создание новой ветви каскада. Это и другие свойства каскада будут продемонстрированы в следующем разделе. Заметим, что по ходу развития каскада идут и обратные процессы рекомбинации выбитых атомов (междуозлий) и вакансий, если они оказываются достаточно близко друг к другу. Их влияние на количественные параметры каскадов также изучено в следующем разделе.

Мы рассматриваем задачу о каскадах, вызванных первично выбитыми атомами, имеющими заданную энергию либо равномерно распределенными по энергиям в некотором интервале. В реальных прикладных задачах для получения функции распределения первично выбитых атомов по энергиям необходимо учитывать взаимодействия начальных нейтронов с атомами мишени. Это нетрудно сделать, если известен спектр нейтронов в данном реакторе и используются стандартные таблицы экспериментальных данных о взаимодействиях нейтронов с ядрами при соответствующих энергиях.

4. ХАРАКТЕРИСТИКИ КАСКАДОВ АТОМНЫХ СМЕЩЕНИЙ В ТВЕРДЫХ ТЕЛАХ

4.1. Общая структура каскадов

По мере развития каскада атомы среды выбиваются из занимаемых ими положений. Линии де-

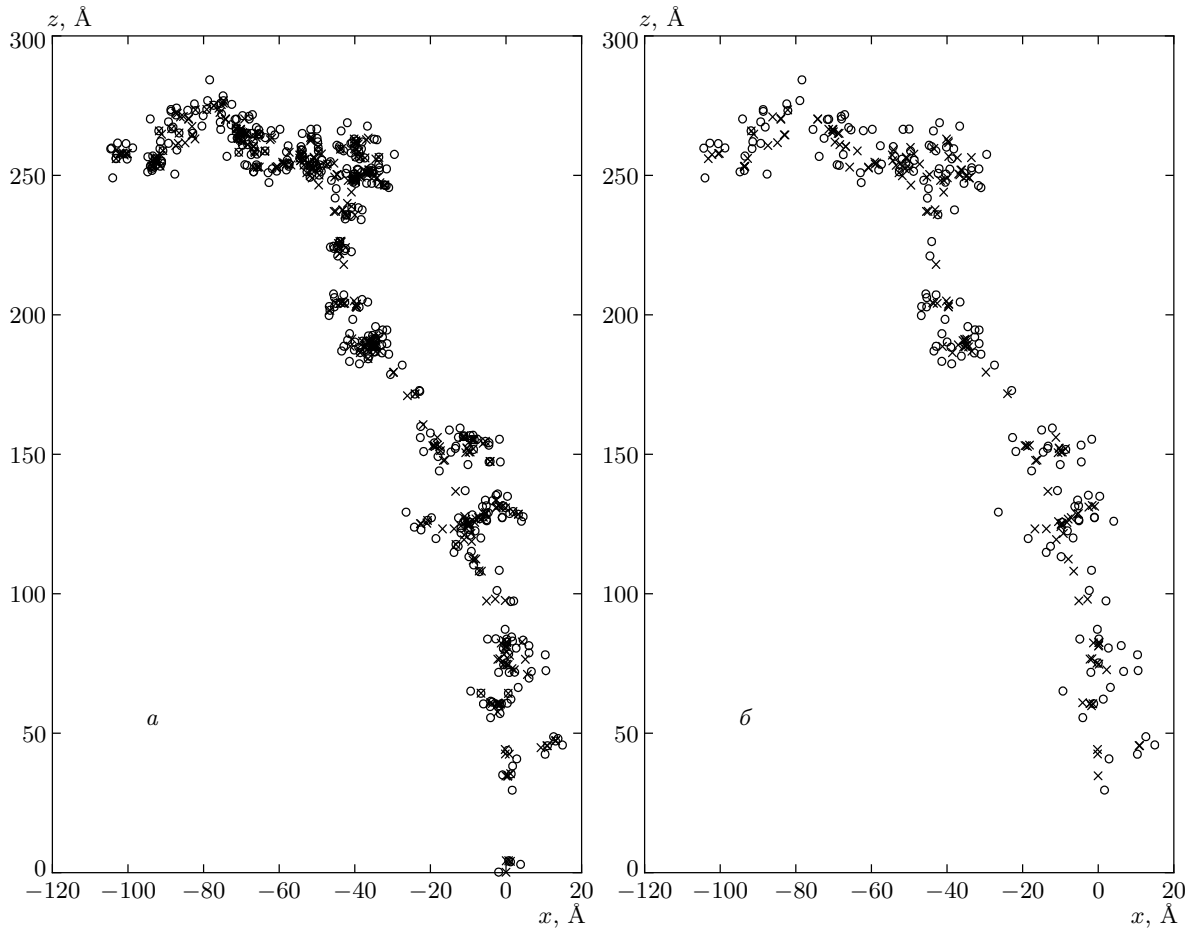


Рис. 2. Двумерная проекция одного из разыгранных каскадов до рекомбинации (а) и после спонтанной рекомбинации (б) в предположении, что рекомбинируют все пары на расстоянии менее 6 Å. Кружки — междоузлия, крестики — вакансии

рева-каскада, соединяющие последовательные места рассеяния (вакансии, или вершины дерева) между собой и с междоузлиями, называются ребрами графа. Таким образом, число вершин в «древесном» каскаде равно числу вакансий (или междоузлий) минус единица, а число ребер (с учетом начального) — суммарному числу вакансий и междоузлий, т. е. удвоенному числу пар Френкеля.

Главная задача состоит в том, чтобы выявлять скопления пар Френкеля, определяя размеры, пространственное распределение и другие параметры таких скоплений. Основное внимание будет уделено достаточно большим скоплениям, образующим субкаскады.

На рис. 2а приведен один из разыгранных каскадов при энергии первично выбитых атомов 300 кэВ (отметим, что дана двумерная проекция трехмерного каскада, и потому во многих местах происхо-

дит слияние тех структур, которые в действительности разделены по оси, перпендикулярной плоскости рисунка). Уже визуальный просмотр этого каскада позволяет найти по крайней мере два характерных типа процессов, возникающих в вершинах каскадного дерева. Основной (наиболее частый) процесс состоит в ионизации или выбивании летящим атомом (ионом) достаточно медленного (в лабораторной системе) атома железа, т. е. он приводит к малой потере энергии. Выбитый атом либо вскоре останавливается, образуя междоузлие, либо еще способен сам выбить небольшое число атомов, т. е. возникает новая ветвь с малым числом веток (ребер).

Значительно реже передача энергии оказывается большей, и выбитый атом сам вызывает появление ветви дерева с довольно большим числом ребер (пар Френкеля). В таких ответвлениях образуются достаточно плотные скопления пар, которые мы и будем

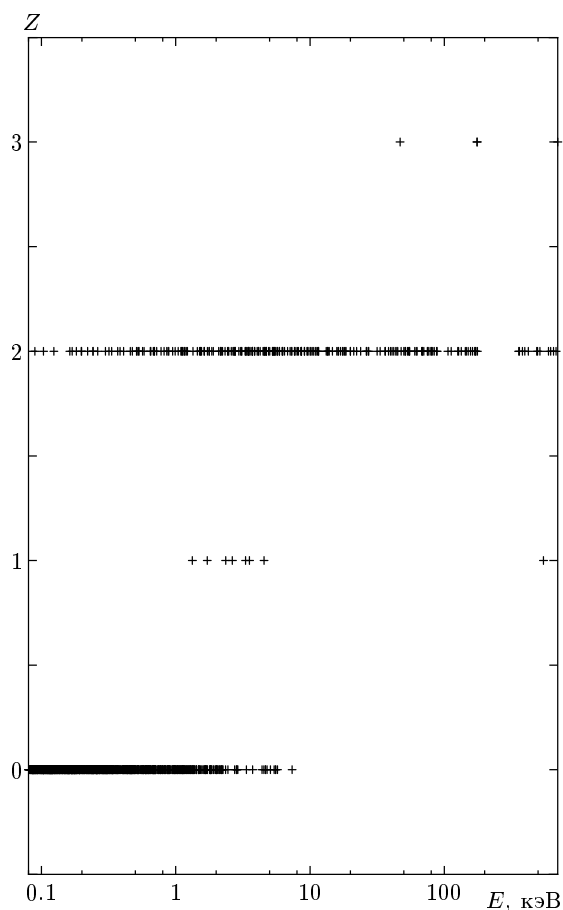


Рис. 3. Заряды Z участников каскада (крестики) с энергией первично выбитых атомов 700 кэВ как функции их энергии

называть субкаскадами. Как показывают расчеты, структура дерева на уровне субкаскадирования существенно образом зависит от проведенного нами учета эволюции зарядовых состояний атомов вдоль их траекторий.

И, наконец, бывают совсем редкие процессы, когда атом со все еще высокой энергией делит ее почти поровну, создавая две похожие ветви. Тогда наблюдаются два мини-каскада с меньшей начальной энергией. Внутри них образуются свои субкаскады. Объяснение такому характеру каскадов легко найти, если учесть, что малые передачи энергии предпочтительны.

Уже из двумерной проекции каскада на рис. 2 видно, что междоузлия располагаются на периферии каскада, тогда как вакансии сгруппированы ближе к его оси и центрам субкаскадов.

Первично выбитый атом вылетает неионизованным. Однако если его энергия велика (порядка де-

сятков или сотен килоэлектронвольт), то он практически мгновенно теряет свою внешнюю оболочку при следующих столкновениях и становится ионом Fe^{2+} . Это видно из сравнения значений оптических толщин на рис. 1а–в. Поэтому лидирующей частицей, определяющей ствол дерева каскада, обычно является ион Fe^{2+} .

Однако число пар в каскаде задается ответвлениями дерева и субкаскадами. Здесь энергии становятся много меньше (сотни электронвольт). Поэтому упругое рассеяние доминирует (см. рис. 1) и основными партнерами становятся нейтральные атомы.

Такая зарядовая структура каскада демонстрируется на рис. 3, где приведены заряды Z участников одного из каскадов с энергией первично выбитых атомов 700 кэВ в зависимости от их энергии. При энергиях выше 5 кэВ практически все участники каскада являются ионами с $Z = 2$. Число нейтральных атомов и ионов с $Z = 1, 3$ пренебрежимо мало. С уменьшением энергии по мере развития каскада основную роль начинают играть нейтральные атомы. Вместе с тем пренебрегать вкладом ионов с $Z = 2$ некорректно даже при малых энергиях. Рисунок 3 ясно демонстрирует важную роль процессов с перезарядкой в формировании структуры каскадов (особенно при больших энергиях) и образовании субкаскадов.

4.2. Число пар Френкеля в каскадах

Интерес представляет зависимость среднего числа n пар Френкеля от начальной энергии E первично выбитых атомов в каскадах. С целью выявления этой характеристики было разыграно 10^4 каскадов в интервале $0.5 \text{ кэВ} \leq E \leq 900 \text{ кэВ}$. В каждом из них прослеживалось число пар Френкеля, образующихся на последовательных стадиях каскада. График суммарного распределения таких пар для разных энергий приведен на рис. 4. Сплошные кривые соответствуют среднему числу пар. Разброс точек вокруг этих кривых, особенно заметный при высоких энергиях, вызван естественным ростом ширины распределения числа пар с ростом энергии²⁾.

Полученные нами результаты совпадают при очень низких энергиях $E \leq 5 \text{ кэВ}$ с предсказаниями модели NRT [35, 36]:

$$n \approx 0.8E/2E_d. \quad (6)$$

²⁾ Подчеркнем, что каждая точка определяет множественность пар в индивидуальном каскаде, а понятие средней множественности предполагает усреднение по каскадам с фиксированной энергией.

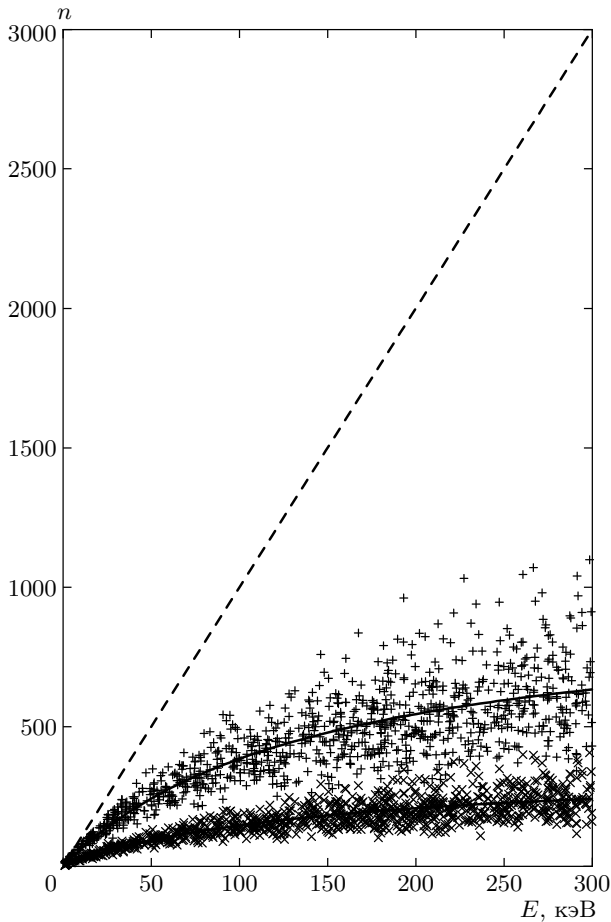


Рис. 4. Зависимость числа пар Френкеля от энергии первично выбитых атомов. Верхняя группа (+) — до рекомбинации, нижняя (x) — после рекомбинации. Сплошные кривые — средние значения числа пар до рекомбинации, штриховая — предсказания модели NRT [35, 36] (до рекомбинации)

Расчет по модели NRT показан штриховой кривой на рис. 4. Однако наши результаты дают заметно меньшие значения числа пар Френкеля при высоких энергиях. Отметим, что недавние расчеты каскадов атомных смещений в рамках молекулярной динамики [37–39] приводят к столь различающимся результатам для разных феноменологических потенциалов взаимодействия атомов без учета изменений зарядов, что не позволяют с уверенностью прийти к каким-либо окончательным заключениям.

Зависимость дисперсии распределения D до рекомбинации от энергии первично выбитых атомов хорошо аппроксимируется степенной функцией с показателем степени 0.5036. Напомним, что ширина пуассоновского распределения растет пропорционально квадратному корню из среднего числа пар

Френкеля. Поскольку рост числа пар с энергией слабее линейного, полученное распределение шире пуассоновского.

После своего образования пары Френкеля могут исчезать за счет спонтанной рекомбинации, если вакансии и междоузлия оказываются на сравнительно малом расстоянии друг от друга. Выше на рис. 2б показано, как после рекомбинации пар с относительным расстоянием меньше 6 \AA выглядит каскад, изображенный на рис. 2а до рекомбинации. В нижней части рис. 4 приведена зависимость от энергии числа сохранившихся (нерекombинировавших) пар для всех разыгранных каскадов при том же условии на относительные расстояния. Видно, что их число в несколько раз меньше числа первичных пар.

Тем не менее субкаскады остаются и проявляются как достаточно большие скопления пар Френкеля в ветвях дерева. Хотя число неаннигилировавших пар заметно меньше, выделяющаяся в данной области энергия остается той же. Поэтому для количественного определения субкаскадов и их параметров будем использовать энергетический (температурно-пространственный) критерий. Именно выделение энергии (тепла) в области субкаскадов определяет характер и интенсивность возникающих термомикров и фазовых выделений.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе рассчитаны характеристики динамической стадии развития каскадов атомных смещений, вызываемых первично выбитыми атомами с энергиями до 900 кэВ. В рамках развитого нами подхода ограничение на энергию не принципиально и связано с диапазоном энергий первично выбитых атомов, представляющим практический интерес, а не с какими-либо ограничениями расчетной схемы. При проведении расчетов методом Монте-Карло использовалось приближение аморфной среды, не учитывающее кристаллическую структуру вещества. Это может быть оправдано тем, что нас в основном интересует макроструктура каскада. Принципиальное отличие от всех предшествующих работ состоит в том, что все необходимые сечения взаимодействия были рассчитаны из первых принципов с использованием функционала плотности, а не феноменологических подгонок потенциалов. При этом были учтены вклады от всех электронных оболочек налетающего атома и атома мишени, а также существенное влияние плотности среды на получаемые сечения. С учетом сечений ионизации и

перезарядки нами была рассмотрена эволюция зарядового состояния налетающего атома с уменьшением его энергии. Этим определяется структура каскада с наличием характерных подструктур (субкаскадов определенных размеров). Такие вычисления удалось сделать с помощью уникальных программ, созданных в ФИАН.

На основе рассчитанных таким способом сечений была сформулирована модель, допускающая алгоритмизацию и построение соответствующих программ вычисления характеристик каскадов. Для выяснения характеристик каскадов разыграно 10^4 каскадов с энергиями E первично выбитых атомов в интервале от 0.5 до 900 кэВ. Получена зависимость числа пар Френкеля от E на момент окончания баллистической стадии и после спонтанной рекомбинации. В низкоэнергетической области при $E \leq 5$ кэВ полученные значения совпадают с известным NRT-стандартом [35, 36], но при более высоких энергиях отличаются от него весьма существенно.

Еще один важный результат состоит в возможности описания закономерностей структуризации каскада с выделением участков траекторий начальных атомов и областей формирования субкаскадов. Само определение субкаскада может несколько изменяться в зависимости от рассматриваемого далее процесса (одно из таких определений и соответствующее ему описание эволюции на термодинамической стадии дается в работе [4]). Подчеркнем, что получение закономерностей структуризации каскада, для рассмотрения которого достаточно приближения аморфной среды, приводит к возможности классификации субкаскадов. Это, в свою очередь, позволяет проводить весьма актуальные расчеты по сопоставлению эффектов первичного радиационного воздействия при существенно различающихся энергетических спектрах повреждающего излучения, например, для реакторов деления и синтеза.

Другим важным результатом, следующим из описания закономерностей структуризации каскадов, является возможность вычисления темпов (в зависимости от дозы облучения) процесса упрочнения корпусных сталей реакторов типа ВВЭР.

ПРИЛОЖЕНИЕ 1

Сечения упругого взаимодействия

Рассмотрим упругие сечения, т. е. сечения процессов без изменения внутренних (в частности, зарядовых) состояний сталкивающихся партнеров. В таких процессах происходит только передача энер-

гии от налетающего атома (иона) к покоящемуся атому среды, который после отдачи сам становится участником развития каскада. Таким образом, этот процесс важен для понимания величины энергетических потерь налетающего партнера и, соответственно, энергетического спектра атомов отдачи. Эти сечения существенно зависят от энергии и от зарядовых состояний сталкивающихся партнеров.

Расчет велся по обычным формулам классической механики. Как известно [2], при рассеянии на потенциале $V(r)$ прицельный параметр b однозначно связан с углом рассеяния θ в системе центра масс формулами

$$\theta = \pi - 2b \int_{r_0}^{\infty} \frac{dr}{r^2 g(r)}, \quad (7)$$

где

$$g(r) = \sqrt{1 - \frac{2V(r)}{E_0} - \frac{b^2}{r^2}}. \quad (8)$$

Здесь E_0 — энергия атома в лабораторной системе. Расстояние r_0 наибольшего сближения двух сталкивающихся атомов, задающее нижний предел интегрирования, определяется из решения уравнения

$$g(r_0) = 0. \quad (9)$$

Дифференциальное сечение рассеяния задается формулой [2, 26]

$$d\sigma = 2\pi b db, \quad (10)$$

или, в несколько ином виде,

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{b}{\sin \theta} \left| \frac{db}{d\theta} \right|. \quad (11)$$

Если известен потенциал, то сечение рассеяния получается интегрированием выражений (10), (11) по углу от некоторого минимального значения до π . Таким образом, знание потенциала взаимодействия является определяющим при проведении расчетов сечений.

Будем рассматривать только парное упругое взаимодействие. Для проведения расчетов воспользуемся теорией функционала плотности, которая позволяет вычислить энергию по заданной электронной плотности. Расчет электронной плотности проведем в простом суперпозиционном приближении. Тогда потенциалы взаимодействия атомов и ионов вычисляются [27] через функционал плотности $\mathcal{E}(\rho)$ по формуле

$$V(R) = \mathcal{E}[\rho_1(R+r) + \rho_2(r)] - \mathcal{E}[\rho_1(R+r)] - \mathcal{E}[\rho_2(r)], \quad (12)$$

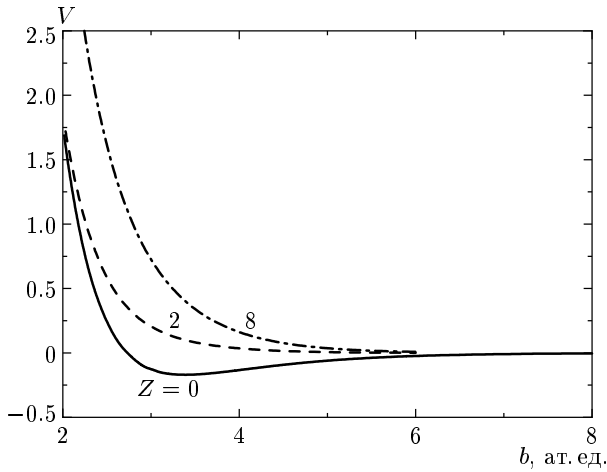


Рис. 5. Потенциалы взаимодействия налетающих атомов ($Z = 0$) и ионов ($Z = 2, 8$) железа с покоящимся атомом железа в зависимости от расстояния между ними

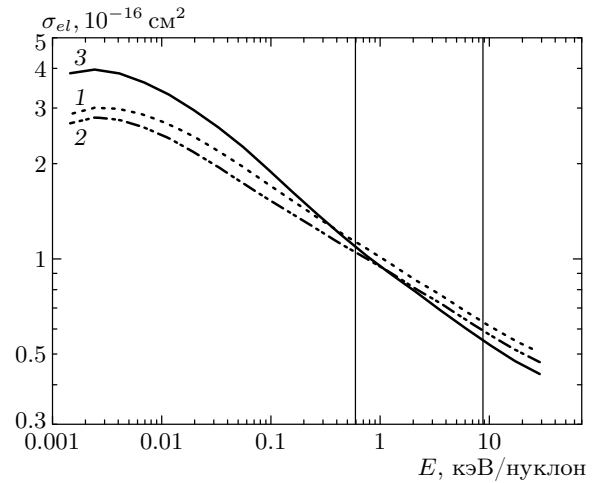


Рис. 6. Зависимость от энергии сечений упругого рассеяния налетающего атома (кривая 1) и ионов железа Fe^{2+} (кривая 2) и Fe^{8+} (кривая 3) на покоящемся атоме железа

где ρ_i — электронная плотность i -го атома (иона), R — расстояние между атомами, а по текущей координате r , связанной с электронной плотностью, проведено интегрирование. Примеры использования этой формулы можно найти в работах [28, 29]. Там же было продемонстрировано, что предложенное выше приближение является достаточно хорошим при описании свойств твердых тел. Для рассматриваемых здесь случаев потенциалы имеют вид, указанный на рис. 5.

С полученными таким способом потенциалами вычислялась по формулам (7)–(9) зависимость прицельного параметра от угла рассеяния. Этим фактически определяется и поведение дифференциальных сечений упругого рассеяния как функций угла и энергии, если использовать формулы (10), (11).

В процессах упругого рассеяния угловые распределения частиц однозначно связаны с их энергетическими распределениями. Чисто кинематически угол рассеяния связан (см., например, [2]) с потерей энергии налетающим атомом (ионом) формулой

$$\Delta E = E_0 \sin^2(\theta/2). \quad (13)$$

В рассматриваемой задаче минимальная потеря энергии определяется либо просто энергией $E_d \approx 40$ эВ, необходимой для образования пары Френкеля в железе, либо энергией порядка 100 эВ, если пренебрегается всеми процессами, когда выбитый атом оказывается практически не в состоянии образовать новую пару Френкеля, а тормозится в среде, теряя свою энергию. Соответственно, в

зависимости от поставленной задачи определяется и минимальный угол рассеяния.

Именно таким способом и вычислялись сечения упругого рассеяния как функции энергии в интересующей нас области. Они приведены на рис. 6 для выбранного угла обрезания, соответствующего минимальной потере энергии, равной 40 эВ (пороговая энергия для железа). Программа расчетов на языке C++ была создана в Отделе теоретической физики ФИАН.

Заметим, что легко определить пределы применимости классического рассмотрения, использованного здесь. Как известно (см., например, [40]), такой подход несправедлив при больших прицельных параметрах, когда следует использовать квантовомеханические формулы. Ниже будет показано, что в нашем случае можно не учитывать влияния больших параметров удара. Физически это связано с тем, что при соударениях с большим прицельным параметром невозможно выбить атом среды, заставив его двигаться. Поэтому малые потери энергии (соответственно и малые углы рассеяния согласно формуле (13)) не приводят к каскадированию, хотя и слегка влияют на энергетические потери налетающего партнера. Поскольку в наших расчетах проводится обрезание на малых углах, квантовомеханические эффекты несущественны.

Для количественного оправдания сделанного утверждения используем оценки, приводимые в книге [40]. Угол классического рассеяния записывается

в виде

$$\theta_{cl} \approx \frac{p_t}{p} \approx \left| \frac{dV(b)}{db} \right| \frac{b}{pv}. \quad (14)$$

Здесь p , p_t и v — соответственно импульс, его поперечная компонента и скорость налетающего партнера. В то же время угол квантовомеханической дифракции оценивается как

$$\theta_d \approx \frac{1}{pb}. \quad (15)$$

Из условия равенства этих углов определяется предельное значение прицельного параметра. Классическое рассмотрение становится неприменимым при значениях этого параметра, больших предельного. Условие для определения предельного значения имеет вид

$$\left| \frac{dV(b)}{db} \right| b^2 \approx v. \quad (16)$$

Для каждого из найденных согласно (12) потенциалов это уравнение решалось численно, и были найдены соответствующие предельные значения прицельных параметров как функции энергии. Затем по формуле (15) определялись углы θ_d . Вычислялись углы обрезания θ_{min} , использованные для определения сечений согласно формуле (13). Было показано, что условие применимости использованного классического подхода

$$\theta_{min} > \theta_d \quad (17)$$

выполняется при всех энергиях с большим запасом в несколько порядков величины.

ПРИЛОЖЕНИЕ 2

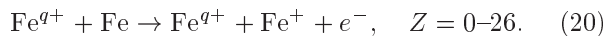
Сечения взаимодействий атомов и ионов железа, сопровождающихся изменением зарядового состояния

Теперь рассмотрим те процессы, в результате которых меняется зарядовое состояние партнеров по взаимодействию, т. е. процесс ионизации налетающего атома (иона) покоящимся атомом, в результате чего получается ион с более высоким зарядом, и процесс захвата налетающим ионом электронов, что приводит к уменьшению заряда этого иона и ионизации покоящегося атома. Учет таких процессов позволяет, в частности, определить долю энергии первично выбитых атомов, уходящую на электронные потери по мере развития каскада.

Сечение ионизации покоящегося атома железа налетающим атомом (ионом) железа при разных энергиях E_p в лабораторной системе

E_p , кэВ/нуклон	σ_{it} , см ²		
	Fe	Fe ²⁺	Fe ⁸⁺
0.1	$3.1 \cdot 10^{-15}$	$3.0 \cdot 10^{-15}$	$3.2 \cdot 10^{-15}$
1.0	$3.3 \cdot 10^{-14}$	$3.0 \cdot 10^{-14}$	$2.0 \cdot 10^{-14}$
10	$3.2 \cdot 10^{-13}$	$2.2 \cdot 10^{-13}$	$2.1 \cdot 10^{-13}$
100	$1.6 \cdot 10^{-13}$	$1.2 \cdot 10^{-13}$	$1.2 \cdot 10^{-13}$
1000	$2.6 \cdot 10^{-14}$	$1.9 \cdot 10^{-14}$	$2.2 \cdot 10^{-14}$

Расчеты сечений ионизации и перезарядки при столкновении налетающих атомов (ионов) железа с покоящимися атомами железа в мишени проводились в широкой области энергий от 0.1 кэВ/нуклон до 1 МэВ/нуклон, т. е. перекрывались четыре порядка по энергии. Итак, были вычислены сечения следующих процессов:



Аналогичные расчеты были проведены для атомов и ионов ряда других веществ, но в данной работе их результаты не используются.

Сечения ионизации вычислялись по программе LOSS, созданной в Оптическом отделе ФИАН и описанной в работе [30]. В ней проведен учет ионизации всех оболочек мишени и атомной структуры налетающих ионов или атомов. Использовалась модификация первого борновского приближения в представлении парциальных волн для оптического электрона (совершающего переход). Волновые функции электрона, переходящего из дискретного в непрерывный спектр, вычислялись путем численного решения уравнения Шредингера в эффективном поле атомного остатка.

Сечения ионизации нейтральных атомов мишени Fe ионами железа (см. таблицу) возрастают от величин порядка 10^{-15} см² при энергиях $E \approx 0.08$ кэВ/нуклон до величин около 10^{-13} см² при энергиях $E \approx 10$ кэВ/нуклон, и с ростом энергии до $E \approx 400$ кэВ/нуклон сечения ионизации постепенно убывают до значений порядка

10^{-14} см². Эти сечения имеют немонотонное поведение в зависимости от заряда налетающих ионов.

Сечения ионизации налетающих ионов железа нейтральными атомами мишени существенно зависят от оболочечной структуры налетающих ионов. Они максимальны (порядка 10^{-13} см²) для Fe, Fe¹⁺ при энергии $E \approx 15$ кэВ/нуклон, а для других кратностей ионизации сечения ионизации уже на порядок величины меньше и достигают максимума при $E \approx 100$ – 200 кэВ/нуклон.

Сечения перезарядки за счет захвата электрона были рассчитаны по программе CAPTURE, также созданной в Оптическом отделе ФИАН и описанной в работе [31]. Расчеты проводились в приближении Бринкмана–Крамерса в представлении параметра удара и с учетом захвата всех возможных оболочек мишени. Использовались нормированные вероятности перезарядки, справедливые даже в случае большого (до 500) числа каналов нормировки. Использовались также водородоподобные волновые функции с эффективным зарядом, учитывающим экранировку ядра мишени.

Сечения перезарядки, вычисленные без учета эффекта плотности мишени (см. ниже), также имеют немонотонный характер. Они квазипостоянны при низких энергиях, а затем убывают по степенному закону как E^{-2} – E^{-3} . Сечение перезарядки максимально для столкновений Fe²⁶⁺ + Fe и достигает максимума $6 \cdot 10^{-13}$ см² при энергии $E \approx 0.08$ кэВ/нуклон. Следует отметить, что при больших энергиях столкновения процессы перезарядки происходят исключительно за счет захвата внутренних электронов атома мишени.

Существенным элементом расчета является учет плотности мишени ($N \approx 0.8 \cdot 10^{23}$ см⁻³). При этом сечения перезарядки уменьшаются на несколько порядков величины. Влияние плотности мишени рассмотрено подробно в работе [32]. Учет влияния плотности приводит к немонотонному (по заряду налетающего иона) поведению сечений перезарядки как функций энергии из-за существенного влияния захвата электронов внутренних оболочек мишени.

Вкратце, влияние плотности на процессы перезарядки состоит в следующем. Полное сечение перезарядки определяется суммой сечений захвата в основное и все возбужденные состояния образующегося иона. Если плотность мишени мала, то эти состояния изменяются от основного до состояний с бесконечно большими квантовыми числами. С ростом плотности возбужденные состояния начинают ионизоваться атомами мишени, что и приводит

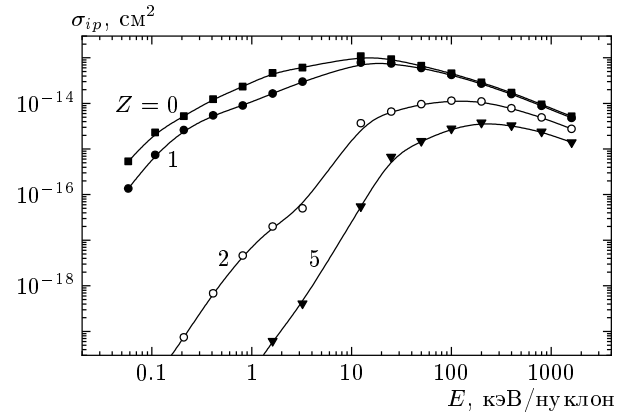


Рис. 7. Зависимость от энергии сечений ионизации налетающего атома ($Z = 0$) и ионов железа ($Z = 1, 2, 5$) покоящимся атомом железа

к уменьшению полных сечений перезарядки. Заметим, что скорость ионизации высоковозбужденных состояний очень велика и пропорциональна величине $Z_t^2 N_t v^{-1} n^2$, где Z_t — заряд ядра атома мишени, N_t — плотность атомов мишени, v — скорость ионов, n — главное квантовое число возбужденного состояния. При очень больших плотностях, как в нашем случае, перезарядка переводит атом в основное состояние и несколько близлежащих состояний, что резко уменьшает величины сечений, которые в данном случае меньше зависят от энергии и заряда налетающего иона. Иначе говоря, при большой плотности атомов мишени сечение перезарядки может иметь и немонотонный характер.

Это наблюдается при расчетах. Величины сечений резко убывают, и поведение сечений оказывается немонотонным. Это сильно усложняет расчеты, особенно с учетом того обстоятельства, что при больших энергиях необходимо находить сечения захвата из всех оболочек атомов мишени.

Тем не менее таким образом были вычислены сечения для столкновений ионов всех кратностей ионизации, включая нейтральные атомы, с учетом влияния плотности твердых тел (мишень). Всего было определено около ста сечений, часть из которых приведена в данной работе.

Рассмотрим изменение заряда налетающего атома (иона) вдоль пути развития каскада. Оно связано лишь с процессами ионизации атомов и ионов и захвата ионом электронов. Сечения этих процессов (σ_{ip} , σ_{ep}) как функции энергии были рассчитаны для всевозможных начальных зарядов (от 0 до 26). Результаты приведены на рис. 7, 8 только для некоторых зарядовых состояний, чтобы не загромо-

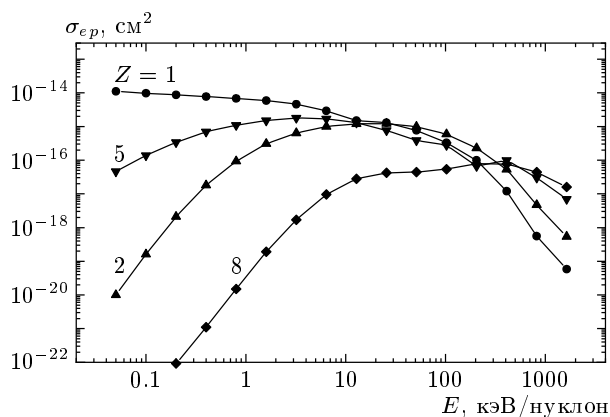


Рис. 8. Зависимость от энергии сечений захвата электрона налетающими ионами железа ($Z = 1, 2, 5, 8$) при их столкновении с покоящимся атомом железа

ждать рисунки.

Как уже упоминалось выше, было рассчитано также сечение σ_{it} ионизации покоящегося атома налетающим атомом или ионом при разных начальных зарядах ионов. Оно зависит от энергии, но практически не зависит от заряда налетающего иона. Это наглядно демонстрирует таблица, где приводятся результаты для атома и некоторых ионов железа. Для остальных ионов величины сечений слабо отличаются от приведенных в таблице.

Поскольку для случая столкновения двух нейтральных атомов ситуация симметричная, данные первого столбца в этой таблице совпадают с кривой для $Z = 0$ на рис. 7. Кривые для ионов близки к этой кривой для атомов из-за практической независимости сечений от заряда иона.

ЛИТЕРАТУРА

1. Н. Бор, *Прохождение атомных частиц через вещество*, Гостехиздат, Москва (1948).
2. В. Экштайн, *Компьютерное моделирование взаимодействия частиц с поверхностью твердого тела*, Мир, Москва (1995).
3. J. Lindhard, V. Nielsen, and M. Scharff, *Math. Phys. Medd. K. Dan. Vid. Selsk.* **36**(10), 1 (1968).
4. И. М. Дремин, О. В. Иванов, В. А. Нечитайло, А. В. Субботин, *Препринт ФИАН TD 13/09.03*.
5. J. A. Brinkman, *J. Appl. Phys.* **25**, 961 (1954).
6. М. И. Каганов, И. М. Лифшиц, Л. В. Танатаров, *ЖЭТФ* **31**, 232 (1956); *Атомная энергия* **6**, 391 (1959).
7. J. R. Beeler, *Phys. Rev.* **150**, 470 (1966).
8. J. J. Dienes and J. H. Vineyard, *Radiation Effects in Solids*, New York (1957).
9. F. V. Nolfi, *Phase Transformations During Irradiation*, Appl. Sci. Publ., London and New York (1983).
10. A. D. Brailsford and R. Bullough, *Phil. Trans. Roy. Soc. London A* **302**, 87 (1981).
11. A. H. King and D. A. Smith, *Rad. Effects* **54**, 169 (1981).
12. L. K. Mansur, A. D. Brailsford, and W. G. Wolfer, *J. Nucl. Mater.* **105**, 36 (1982).
13. А. В. Субботин, *Атомная энергия* **43**, 100 (1977).
14. В. М. Агранович, В. В. Кирсанов, *УФН* **118**, 3 (1976).
15. K. Nordlund and R. S. Averback, *J. Nucl. Mater.* **276**, 194 (2000).
16. R. S. Averback, *J. Nucl. Mater.* **216**, 49 (1994).
17. A. Souidi, M. Hou, C. S. Becquart, and C. Domain, *J. Nucl. Mater.* **295**, 179 (2001).
18. D. J. Bacon, F. Gao, and Yu. N. Osetsky, *J. Nucl. Mater.* **276**, 1 (2000).
19. A. Caro, M. Alurralde, R. Saliba, and M. Caro, *J. Nucl. Mater.* **251**, 72 (1997).
20. D. J. Bacon, A. F. Calder, and F. Gao, *J. Nucl. Mater.* **251**, 1 (1997).
21. А. Б. Мигдал, *ЖЭТФ* **9**, 1163 (1939); *Качественные методы в квантовой теории*, Наука, Москва (1975), с. 89.
22. Е. Л. Фейнберг, *ДАН* **23**, 778 (1939); *Дисс. . . канд. физ.-матем. наук*, МГУ, Москва (1939).
23. А. М. Дыхне, Г. Л. Юдин, *Внезапные возмущения и квантовая эволюция*, ред. УФН, Москва (1996).
24. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Квантовая механика*, Физматгиз, Москва (1963), с. 293.
25. Н. М. Соболевский, Э. А. Коптелов, С. Г. Лебедев, А. В. Субботин, *Отчет 070-082-038*, ФГУП НИКИЭТ им. Н. А. Доллежалы, Москва (2001).
26. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Механика*, Физматгиз, Москва (1958), с. 66.

27. W. Kohn and L. J. Sham, Phys. Rev. **140**, 1133 (1965).
28. O. V. Ivanov and E. G. Maksimov, Phys. Rev. Lett. **69**, 108 (1992).
29. О. В. Иванов, Е. Г. Максимов, ЖЭТФ **108**, 1841 (1995).
30. V. P. Shevelko, I. Yu. Tolstikhina, T. Stohler, Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B **184**, 295 (2001).
31. В. П. Шевелько, ЖТФ **71**(10), 30 (2001).
32. О. Розмей, И. Ю. Толстихина, В. П. Шевелько, ЖТФ **73**(9), 31 (2003).
33. И. М. Соболев, *Численные методы Монте-Карло*, Наука, Москва (1973).
34. Standard E693, *Annual Book of ASTM Standards*, Vol. 12.02, American Society of Testing and Materials, Philadelphia, PA (2003).
35. M. J. Norgett, M. T. Robinson, and J. M. Torres, Nucl. Eng. Des. **33**, 50 (1975).
36. Standard E521, *Annual Book of ASTM Standards*, Vol. 12.03, American Society of Testing and Materials, Philadelphia, PA (2003).
37. C. S. Becquart, C. Domain, A. Legris, and J. C. Van Duysen, J. Nucl. Mat. **280**, 73 (2000).
38. R. S. Averback and T. Diaz de la Rubia, Sol. St. Phys. **51**, 281 (1998).
39. K. Nordlund and R. S. Averback, Phys. Rev. B **56**, 2421 (1997).
40. А. Б. Мигдал, В. П. Крайнов, *Приближенные методы квантовой механики*, Наука, Москва (1966), с. 39.