

## О ВЗАИМОДЕЙСТВИИ ЗАРЯЖЕННЫХ ЧАСТИЦ С ТВЕРДЫМ ТЕЛОМ (некоторые вопросы теории)

В.В. Углов, Н.Т. Квасов, Н.Н.Дорожкин И.В.Сафронов  
БГУ, Минск, Беларусь

В настоящей работе на базе таких основных понятий как электронное  $S_e$  и ионное  $S_n$  сечения торможения предложено пространственно-временное описание динамики торможения иона в веществе. Например, для частного случая  $S_e \sim v$  и  $S_n = \text{const}$  закон движения  $x(t)$  определяется следующей формулой  $x(t) = (C_1 v_0 + C_2) [1 - \exp(-C_1 t)] / C_1 - C_2 t / C_1$ , здесь  $C_1$  и  $C_2$  определяются, соответственно, через  $S_e$  и  $S_n$ . Приводятся соответствующие зависимости длины пробега  $L(v_0) = x(v_0, \tau)$  (где  $\tau$  – время пробега) для случая взаимодействия ионов N, C, Si, Fe, Kr, Au с монокристаллами железа при разных начальных скоростях  $v_0$ . Проведено сравнение с результатами эксперимента и компьютерного моделирования с помощью программы SRIM/TRIM-2013. В целях определения структуры пороговой энергии дефектообразования  $E_d$  проведено детальное рассмотрение динамики неустойчивых френкелевских пар, представляющих собой кратковременное ( $10^{-12} - 10^{-11}$  с) раздельное существование вакансии и выбитого из узла решетки атома. Скорость его движения  $v(t)$  при  $E < E_d$  в области зоны неустойчивости радиуса  $R$  можно получить из следующего уравнения:  $dv/dt + \xi v + f(r) = 0$ , где  $\xi$  – эффективный коэффициент диссипации кинетической энергии движения атома,  $f(r)$  – сила электростатического взаимодействия, отнесенная к единице массы. Получена формула для определения  $\xi$  и проведена оценка потерь энергии атома в области зоны неустойчивости. Предложена структура пороговой энергии дефектообразования  $E_d = E_{св} + \Delta E_d$ , где  $E_{св}$  – энергия связи атома в решетке,  $\Delta E_d = A_3 + m \xi \bar{v} R$ ,  $A_3$  – работа по преодолению сил электростатического притяжения. Для  $\alpha$ -Fe методом молекулярной динамики проведен расчет  $E_{св}$ . Показано, что  $\Delta E_d$  значительно больше  $E_{св}$ .