

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 τ – 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 ξ – эффективный коэффициент диссипации кинетической энергии движения атома, $f(r)$ – сила электростатического взаимодействия, отнесенная к единице массы. Получена формула для определения ξ 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 $\alpha - \text{Fe}$ методом молекулярной динамики проведен расчет $E_{св}$. Показано, что ΔE_d значительно больше $E_{св}$.