

П. Б. Кац, А. В. Архутик

P. Kats, A. Arkhutsik

Брестский государственный университет имени А. С. Пушкина

(Брест, Беларусь)

**ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПРЕДЕЛОВ ПРИМЕНИМОСТИ
УПРОЩЕННОЙ ФОРМУЛЫ МАККИНЛИ –
ФЕШБАХА ДЛЯ СЕЧЕНИЯ ПЕРВИЧНОГО
СМЕЩЕНИЯ АТОМОВ ДЛЯ НЕКОТОРЫХ ПРИМЕРОВ**

**DETERMINING THE LIMITS OF APPLICABILITY
SIMPLIFIED MCKINLEY – FESHBACH FORMULA
FOR THE CROSS SECTION OF THE PRIMARY
DISPLACEMENT OF ATOMS FOR SOME EXAMPLES**

Для ряда примеров рассчитано, начиная с какой энергии электронов E различие сечения, полученного по асимптотической формуле, от полученного по формуле Маккинли – Фешбаха, будет менее 1 %. Результаты приведены в таблице. Отношение полученной энергии электрона к пороговой кинетической энергии электрона, при которой происходит смещение, меняется для рассмотренных случаев от 15,1 до 209,7. Это показывает, что требуется с большой осторожностью применять упрощенную формулу для расчета сечения первичного смещения атома.

For a number of examples, it is calculated starting from which electron energy E the difference of the cross section obtained by the asymptotic formula from the one obtained by the McKinley – Feshbach formula will be less than 1%. The results are shown in the table. The ratio of the received electron energy to the threshold kinetic energy of the electron at which the displacement occurs varies for the considered cases from 15,1 to 209,7. This shows that it is necessary to apply a simplified formula with great care to calculate the cross section of the primary displacement of the atom.

Ключевые слова: рассеяние электронов, сечение первичного смещения атомов, формула Маккинли – Фешбаха.

Keywords: electron scattering, atomic primary displacement cross section, McKinley-Feshbach formula.

Для анализа воздействия потоков частиц высокой энергии на материалы вычисляется сечение смещения атомов. Смещение атомов в кристалле может вызываться только релятивистскими электронами [1]. Для расчетов сечения первичного смещения атома, следовательно, надо применять моттовское сечение рассеяния для релятивистских электронов [2, 3]. Так как это сечение рассеяния выражается через медленно сходящиеся ряды, то чаще для упрощения расчетов используют второе борновское приближение моттовского сечения [4]. Выражение для него приводится в работе [5]:

$$\sigma_{pMF} = \frac{\pi Z^2 e^4}{m^2 c^4 \beta^4} (1 - \beta^2) \left\{ \frac{1}{y} - 1 + \beta^2 \ln(y) + \pi \alpha \beta \left(\frac{2}{\sqrt{y}} - 2 + \ln(y) \right) \right\}, y = \frac{T_d}{T_m}, \quad (1)$$

T_d – пороговая энергия – минимальная энергия, передаваемая атому, при которой он может сместиться из узла кристаллической решетки. T_m – энергия, которая может быть передана атому при лобовом столкновении:

$$T_m = \frac{2E(E + 2m_e c^2)}{Mc^2}, \quad (2)$$

m_e и M – массы электрона и ядра, E – кинетическая энергия электрона. β – отношение скорости электрона к скорости света в вакууме.

Там же показано, что в пределе высоких энергий дифференциальное сечение рассеяния стремится к постоянной величине:

$$\sigma_{pass} = \frac{\pi Z^2 e^4}{m^2 c^4 \beta^4} (1 - \beta^2) \frac{T_m}{T_d} = \frac{2\pi Z^2 e^4}{T_d M c^2}. \quad (3)$$

При каких конкретно энергиях это происходит, для каждого конкретного случая надо оценивать специально.

Иногда при расчетах не учитывается корректность применения асимптотической формулы. Например, авторы предполагают, что можно использовать асимптотическую формулу при энергии электронов в 3–4 раза выше пороговой энергии, или даже применяют асимптотическую формулу при энергии, лишь немного превышающей пороговую.

В данной работе мы для ряда примеров, для которых в различных источниках используют определенные значения T_d , рассчитали, начиная с какой энергии электронов E отличие сечения, полученного по асимптотической формуле, от полученного по ф. (1) будет менее 1 %. Результаты приведены в таблице. Также приводится $\frac{E}{E_d}$ – отношение кинетической энергии электрона к пороговой кинетической энергии, при которой происходит смещение. E_d можно найти из (2), приравняв T_m к T_d .

Таблица – Сечение первичного смещения атома

Z = 4, M = 9,012			T _d , эВ	E, МэВ	E/E _d	29[9]	71,7	168,3
T _d , эВ	E, МэВ	E/E _d	14 [6]	11,4	76,0	Z = 24, M = 63,54		
22[6]	2,78	33,3	16 [9]	3,393	20,1	T _d , эВ	E, МэВ	E/E _d
Z = 5, M = 10,81			Z = 14, M = 28,09			22[9]	66,76	175,7
T _d , эВ	E, МэВ	T _d , эВ	T _d , эВ	E, МэВ	E/E _d	24[6]	69,71	171,4
28 [6]	4,89	39,7	13	15,4	105,7	Z = 25, M = 54,94		
Z = 6, M = 12,01			24 [7]	18,7	75,6	T _d , эВ	E, МэВ	E/E _d
T _d , эВ	E, МэВ	E/E _d	25[7]	18,92	73,9	19[6]	67,25	190,3
18 [7]	2,92	32,3	33[8]	20,6	64,1	Z = 26, M = 55,85		
33 [6]	5,61	35,8	100 [10]	11,17	15,1	T _d , эВ	E, МэВ	E/E _d
Z = 8, M = 16,00			Z = 15, M = 30,97			16 [9]	65,43	209,7
T _d , эВ	E, МэВ	E/E _d	T _d , эВ	E, МэВ	E/E _d	20[6]	73,11	196,0
16,5 [8]	3,064	28,2	12	18,36	124,1	Z = 27, M = 58,93		
100[8]	11,92	24,2	Z = 22, M = 47,87 [9]			T _d , эВ	E, МэВ	E/E _d
Z = 12, M = 24,31			T _d , эВ	E, МэВ	E/E _d	22[6]	82,54	197,0
T _d , эВ	E, МэВ	E/E _d	19	53,05	167,6	23[9]	84,4	194,6
14	2,872	21,0	Z = 23, M = 50,94			Z = 30, M = 65,38		
25	4,834	21,3	T _d , эВ	E, МэВ	E/E _d	T _d , эВ	E, МэВ	E/E _d
Z = 13, M = 26,98			26 [6]	67,9	159,4	52 [8]	152	179,4

E/E_d меняется для рассмотренных случаев от 15,1 до 209,7. Интересен случай алюминия – при переходе от $T_d = 14$ эВ к $T_d = 16$ эВ E/E_d падает от 76 до 20,1. Это связано с тем, что при $T_d = 14$ эВ погрешность опускается ниже 1 % уже при энергии 2,98 МэВ, но уже при 7,9 МэВ становится по модулю выше 1 % и достигает максимального по модулю значения около 1,024 %.

Для рассмотренных в данной работе элементов второе борновское приближение дает хорошую точность и можно полагать, что погрешность асимптотического выражения менее 1 % для второго борновского приближения обеспечивает соответствующее малое значение погрешности для точного сечения смещения. Отметим, что при энергиях более 10 МэВ уже начинает играть роль размер ядра и само использование моттовского сечения рассеяния, полученного для точечного ядра, не является точным.

Список использованных источников

1. Зеленский, В. Ф. Радиационные дефекты и распухание металлов / В. Ф. Зеленский, И. М. Неклюдов, Т. П. Черняева. – Киев. : Наук. думка, 1988. – 296 с.
2. Mott, N.F. The Scattering of Fast Electrons by Atomic Nuclei / N.F. Mott // Proc. Roy. Soc. A – 1929. – V. 124 – P. 425 – 442.

3. Mott, N.F. The Polarisation of Electrons by Double Scattering / N.F. Mott // Proc. Roy. Soc. A – 1932. – V. 135 – P. 429 – 458.
4. McKinley, W.A. The Coulomb Scattering of Relativistic Electrons by Nuclei / William A. McKinley Jr, H. Feshbach // Phys. Rev. – 1948. – V. 74, № 12. – P. 1759–1763.
5. Khandelwal, G.S. Displacement Cross Sections for Fast Electrons Incident on Gold / G.S. Khandelwal, E. Merzbacher // Phys. Rev. – 1963. – V. 130, № 5. – P. 1822–1825.
6. MeV electron irradiation induced crystallization in metallic glasses: Atomic structure, crystallization mechanism and stability of an amorphous phase under the irradiation / T. Nagase et al // Journal of Non-Crystalline Solids. – 2012. – V. 358. – P. 502-518.
7. Similarities and distinctions of defect production by fast electron and proton irradiation: moderately doped silicon and silicon carbide of n-type / V.V. Emtsev et al // Физика и техника полупроводников, 2012, том 46, вып. 4. – 2012. – т. 46, вып. 4. – С. 473–481.
8. Дудин, А. Н. Образование пар Френкеля в ZnO_2 , SiO_2 , Al_2O_3 под действием электронного и протонного облучения / А. Н. Дудин, В. Ю. Юрина // Вестник АмГУ, 2022. – вып. 97. – С. 47–53.
9. The dynamics of electron beam scattering on metal membranes: nanopore formation in metal membranes using transmission electron microscopy / Hyun-Mi Kim et al // Nano Convergence, 2018. – 5, 32. 7 P.
10. Астапова, Е. С. Расчет концентрации дефектов по модели упругого взаимодействия / Е. С. Астапова, Е. А. Ванина, И. В. Гопиенко // Моделирование систем, 2005. №1 (9). – С. 23–26.