1961 г. Июль *Т. LXXIV, вып. 3*

УСПЕХИ ФИЗИЧЕСКИХ НАУК

ДИНАМИКА РАДИАЦИОННОГО ПОВРЕЖДЕНИЯ*)

Дж. Вайнгард

1. ВВЕДЕНИЕ

Первичным эффектом повреждения кристаллической решетки излучением высокой энергии является внезапная передача одному из атомов решетки достаточно большой кинетической энергии (от 10 до, вероятно, 10^5 *эв*). Возбужденный атом прорывается сквозь решетку, выталкивая другие атомы с их мест и оставляя за собой область повреждения. С теоретической точки зрения такой процесс надо рассматривать как сложную проблему многих тел; в прошлом ее пытались решать только с помощью грубых приближений[1].

Обычно рассматривают каскад независимых парных столкновений между ударяющими и покоящимися атомами. Принимается, что соударяющиеся атомы движутся свободно в промежутке между столкновениями, а покоящиеся атомы ведут себя так, как если бы они были распределены случайно. При этом их связи в решетке учитываются крайне упрощенно, считая, что атомы оказываются смещенными и переходят в группу свободных каждый раз, когда они приобретают энергию выше некоторого порога (обычно принимают около 25 *эв*).

На основе каскадной модели можно предсказать, что элементарное повреждение будет заключаться в появлении некоторого количества промежуточных атомов и равного им числа вакантных мест решетки, распределенных беспорядочно в малом объеме. Были предложены и другие модели, в которых предпочтение отдается эффектам действия многих тел. К числу таких принадлежат представления о термических пиках и пиках смещения. В случае первых предполагается, что пространство вблизи места соударения испытывает как бы внезапное нагревание, и последующее его охлаждение рассматривается как подчиняющееся классическим законам распространения тепла в гомогенной среде.

В модели пиков смещения эта качественная картина повреждения дополняется представлением о некоем миниатюрном «взрыве», происходящем в области соударения. Все эти модели трудно согласовать друг с другом, каждая имеет свои слабости. Попытка внести частные поправки не привела пока к успеху. Нам представляется, что аналитические методы здесь непригодны и что для решения задачи нужно использовать числовые способы расчета с помощью быстродействующих счетных машин.

Наш прием состоит в рассмотрении кристаллита, содержащего разумно большое число атомов, взаимодействующих друг с другом с силами,

---

*) Лекция, прочитанная в Центре по изучению ядра в Испре 5—13 сентября 1960: G. H. Vineyard, The Dynamics of Radiation Damage, Phys. Rev. 120, 1229 1960). Перевод под редакцией С. Т. Конобеевского.

близкими к действительным. При этом атомам, находящимся на внешних поверхностях, придаются еще добавочные силы, имитирующие реакцию атомов внешней области, как будто бы кристаллит был действительно включен в бесконечную кристаллическую среду. Процесс радиационного повреждения начинается с момента, когда все атомы находятся на своих нормальных позициях в решетке и все, кроме одного, находятся в покое. Этому единственному атому сообщается то или иное количество кинетической энергии в выбранном направлении, как будто бы он только что получил толчок от налетевшей частицы. Теперь начинает действовать быстродействующая счетная машина. Она интегрирует классические уравнения движения для совокупности атомов и показывает, как передается энергия от первичного возбужденного (получившего толчок) атома к его соседям, какими путями развивается движение и как, наконец, оно затухает, заставляя атомы прийти в состояние покоя, образовав новую конфигурацию повреждения. Была выполнена серия таких пробегов машины, чтобы иметь достаточно полный набор начальных условий.

Программа счетной машины может также быть использована для изучения энергии равновесия и установления равновесной конфигурации, а также других свойств дефектов кристаллической решетки, допускаемых моделью. Для этого принимается то или иное расположение атомов в дефектах и оно используется в качестве начального состояния при нулевой начальной скорости (в действительности следует придать некоторую весьма малую кинетическую энергию одному из атомов, чтобы нарушить симметрию исходной конфигурации).

Все вычисления были сделаны для металлической меди. Этот металл был выбран как наиболее типичный и простой, а также потому, что большинство экспериментов по радиационному повреждению при низких температурах было выполнено на меди.

Следует указать еще одно важное ограничение производимых вычислений. Вследствие ограничения в скорости и емкости памяти примененной машины размеры основного блока кристалла были выбраны небольшими. Бóльшая часть приведенных здесь расчетов сделана с кристаллитами, содержащими около 500 атомов. Некоторые выполненные в последнее время расчеты охватывают кристаллит с 1000 атомов.

2. МОДЕЛЬ

Как было сказано, расчеты производились для модели, предназначенной представлять металлическую медь. Было принято, что атомы взаимодействуют посредством парных отталкивательных центральных сил типа Борна — Майера, т. е. что энергия взаимодействия пары атомов на расстоянии r равна

$$\varphi(r) = Be^{-\beta r}. \tag{2,1}$$

Такое взаимодействие представляет отталкивание при непосредственном сближении. О выборе констант уравнения будет сказано дальше. Так как нужно иметь также притяжение, то в качестве последнего принята постоянная действующая внутрь сила, приложенная к каждому атому поверхности, ограничивающей кристалл. В конфигурации, соответствующей равновесию, эта сила точно уравновешивает силы отталкивания Борна — Майера, действующие между соседними атомами. Эта конфигурация, разумеется, должна быть гранецентрированной кубической с периодом, соответствующим решетке меди.

Так как все рассматриваемые кристаллиты представляют прямоугольные параллелепипеды, поверхностные силы, действующие на атомы, нахо-

дящиеся на гранях, направлены перпендикулярно к этим граням; силы, действующие на атомы ребер, перпендикулярны к ребрам и направлены по ⟨110⟩ и, наконец, силы, действующие на атомы в вершинах, направлены внутрь по большой диагонали. При любой деформации, включающей малые смещения поверхностных атомов, эти поверхностные силы дают вклад в общую энергию связи, пропорциональный изменению объема кристаллита. Таким образом, эти силы могут представлять некоторую энергию связи, которая является функцией только объема кристалла и которая должна меняться с объемом соответственным образом, чтобы уравновешивать борн-майеровское отталкивание. В одновалентном металле таким источником связи служат электроны проводимости, и их энергию связи с достаточным приближением можно считать зависящей только от объема. Таким образом, принятые выше постоянные поверхностные силы представляют в первом приближении эффект связи проводящих электронов. Так как наша модель не является чисто центросимметричной, она не будет требовать сохранения условий Коши для упругих констант.

Поскольку предполагается, что кристаллит ведет себя как совокупность атомов внутри бесконечной совершенной кристаллической среды, необходимо еще иметь некоторые дополнительные силы для поверхностных атомов, которые воспроизводили бы силы реакции атомов вне выбранного объема, вызываемые теми или иными смещениями атомов, находящихся внутри микрокристалла. При малых смещениях выражение для этих реакций может быть написано в виде функции Грина и интеграла по ходу движений в кристалле. Однако при данных вычислениях эти приемы едва ли выполнимы, как вследствие трудностей нахождения гриновских функций в явном виде, так и вследствие возрастающих требований к накоплению информации при работе машины. Вместо этого в качестве добавочных поверхностных сил были просто взяты квазиупругие, «пружинные» силы, пропорциональные величине смещения поверхностных атомов, вместе с вязкими силами, пропорциональными скоростям этих атомов. Это является только некоторым приближением к истинным силам реакции, но можно думать, что при правильном выборе постоянных упругости и вязкости они будут равнозначны истинным силам в пределах необходимой точности.

Пружинные силы воспроизводят свойство среды, непосредственно примыкающей к кристаллиту, сопротивляться медленным или статическим деформациям кристаллита посредством системы сил, пропорциональных величине этой деформации.

Результаты показывают, что чувствительность к граничным эффектам не слишком велика; это демонстрируется в случаях, когда динамические явления рассматриваются дважды, беря начало в различных точках внутри кристаллита, а также когда одно и то же событие совершается как в большом, так и в малом кристаллите. За исключением некоторых специальных проб, все расчетные эксперименты были проделаны с тремя основными микрокристаллитами, которые в дальнейшем обозначены через A, B и C. Все они представляют собою прямоугольные параллелепипеды, ограниченные гранями ⟨100⟩.

Группа A построена из $5\times4\times4$ элементарных ячеек и содержит 446 атомов. Группа B состоит из $2\times6\times7$ ячеек или 488 атомов (рис. 1). Группа C имеет $2\times9\times10$ ячеек и заключает в себе 998 атомов.

Для отталкивательного потенциала было выбрано выражение Борна—Майера (см. (2,1)), следуя Хантингтону [3,4] и Зейтцу [3] в их работах по точечным дефектам и диффузии в гранецентрированных кубических металлах. При этом допускается приближение, но можно ожидать, что оно окажется подходящим для области расстояний, существенных в данной

задаче, если, конечно, константы B и β будут надлежащим образом выбраны. При очень большом сближении потенциалы взаимодействия могут быть найдены, исходя из теоретических соображений, при расстояниях же, близких к равновесным в кристалле, некоторая информация может быть получена из рассмотрения данных по упругим постоянным, а также и из опытов по рассеянию атомов на атомах, которые были выполнены на газах. К сожалению, проблема радиационного повреждения требует знания потенциала при промежуточных расстояниях, где как раз отсутствует надежная информация. Мы попытались перекрыть этот промежуток следующим образом. Выбираем три потенциала борн-майеровского типа, которые в дальнейшем обозначаются просто тремя номерами. Все они таковы, что, будучи взяты для равновесных расстояний между атомами, более или менее хорошо передают как значения упругих постоянных, так и их изменения с давлением. С другой стороны, они представляют собою допустимые экстраполяции к большим расстояниям теоретически определенного отталкивательного потенциала, взятого для трех различных малых расстояний. Различие между этими тремя потенциалами наиболее сильно выявляется в значении пороговой энергии для устойчивого радиационного смещения атома, и выбор между ними в конечном счете был сделан путем сравнения рассчитанных по трем формулам значений пороговой энергии с измеренными.

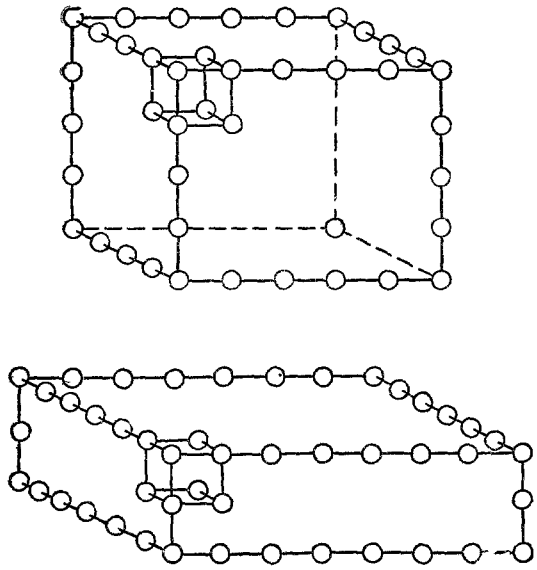

Рис. 1. Две схемы расположения атомов, использованные при вычислениях. Вверху схема A, внизу — B.

На рис. 2 показаны различные кривые потенциальной энергии отталкивания пары медных атомов в функции взаимного расстояния атомов пары. При расстояниях, меньших чем 0,1 Å, хорошим приближением является экранированный кулоновский потенциал, предложенный Бором, а именно:

$$\varphi = \frac{Z^2 e^2}{r} \exp\left(-\frac{r}{\alpha}\right),$$

где

$$\alpha = \frac{a_0}{\sqrt{2}} Z^{\frac{1}{3}}$$

и Z — атомный номер, e — заряд электрона, a_0 — радиус Бора.

На больших удалениях потенциал Бора безусловно слишком мал. Теоретические потенциалы, которые при умеренно малых расстояниях должны быть лучше боровского и согласоваться с ним при очень малых расстояниях, были найдены Абрагамсоном с помощью приближений Томаса — Ферми и Томаса — Ферми — Дирака (на рис. 2 обозначаются соответственно ТФ и ТФД). ТФД-кривая, вероятно, является лучшей. Обе, однако, оказываются непригодными при расстояниях около 1 Å,

поэтому кривые на рисунке проведены только немного далее этого значения абсциссы. Три борн-майеровских потенциала, использованные в данной работе, представлены тремя прямыми линиями, обозначенными Пот. *1*, Пот. *2* и Пот. *3*.

Потенциалы *1* и *2* близки к тем, которые были предложены ранее Хантингтоном для меди. Для энергий в области значений от 1 до 100 *эв* потенциал *2* изображает атом меньшего размера, чем *1*. Из рис. 2 видно, что любая из трех кривых может быть легко присоединена к ТФД-кривой

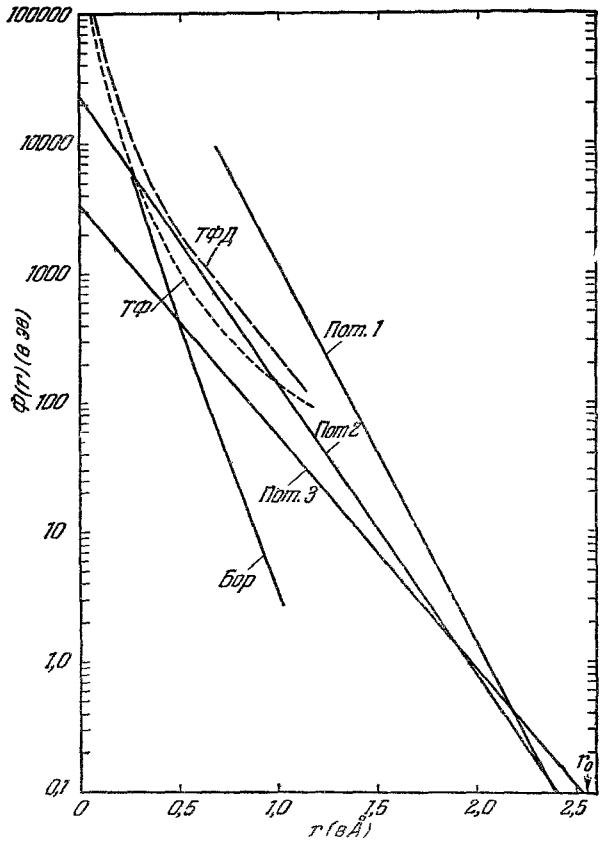

Рис. 2. Различные виды энергии отталкивания пары медных атомов.

Потенциалы, обозначенные *1*, *2* и *3*, использованы в вычислениях, r_0 — межатомное расстояние при равновесии.

на отрезке между 100 и 1000 *эв*, а между 10 и 100 *эв* то же может быть сделано с небольшими поправками, хотя если потребуется наименьшее изменение для потенциала *2*, то для *1* это вызовет необходимость более сложной кривой. Допуская, что существует значительная недостоверность также и результатов, полученных с помощью ТФД-кривой, мы заранее не исключаем потенциалы *1* и *3* для области низких и средних энергий, хотя потенциал *2* выглядит лучше. В дальнейшем будет показано, что все три потенциала дают качественно близкие результаты как для статических конфигураций дефектов решетки, так и для случаев динамического повреждения, но что касается пороговой энергии, необходимой для создания

устойчиво смещенных атомов, то они очень различны для всех трех. а именно оказываются слишком высокими для *1*, слишком низкими для *3* и приблизительно правильными для *2*. Большая часть наших расчетов поэтому сделана с потенциалом *2*.

Чтобы точнее определить потенциалы, удобнее представить уравнение (2,1) в общепринятой форме

$$\varphi = A \exp\left[-\frac{\varrho(r-r_0)}{r_0}\right], \tag{2,2}$$

где r_0 — расстояние между ближайшими соседями при нулевом давлении и абс. 0°. Приняв r_0 для меди равным 2,551 Å, получим константы A и ϱ для потенциалов, используемых в настоящей работе, согласно данным таблицы.

Таблица

Постоянные в формуле для потенциала Борна—Майера, используемого в работе (см. уравнение (2,2))

Потенциал	A (в эв)	ϱ
1	0,0392	16,97
2	0,0510	13,97
3	0,1004	10,34

3. МЕТОД ВЫЧИСЛЕНИЯ
(интегрирование уравнений движения)

Пусть i-я атомная координата в момент времени t будет $x_i(t)$; связанную с ней скорость назовем $v_i(t)$. где $i = 1,2,\ldots,N$, и N — утроенное число атомов в кристаллите. Силы, действующие на i-ю степень свободы, зависят в общем от мгновенного положения всех атомов. В случае, когда x_i относится к атому на границе, сила дополнительно зависит от скорости i-й степени свободы (благодаря вязкому затуханию). Таким образом, сила всегда может быть написана как

$$F_i = [x_1(t),\ldots,x_N(t);\ v_i(t)].$$

Пусть m — масса атома; тогда классические уравнения движения системы запишутся в виде

$$\dot{v}_i(t) = m^{-1}F_i[x_1(t),\ldots,x_N(t);\ v_i(t)], \tag{3,1}$$

$$\dot{x}_i(t) = v_i(t), \quad i = 1, 2, \ldots, N. \tag{3,2}$$

Наш прием состоит в замене производных по времени конечными разностями, выбрав соответствующий интервал Δt:

$$\dot{v}_i(t) \cong \frac{v_i\left(t+\frac{\Delta t}{2}\right) - v_i\left(t-\frac{\Delta t}{2}\right)}{\Delta t}, \tag{3,3}$$

$$\dot{x}_i\left(t+\frac{\Delta t}{2}\right) \cong \frac{x_i(t+\Delta t) - x_i(t)}{\Delta t}. \tag{3,4}$$

В уравнении (3,2) t заменяется через $t+\frac{\Delta t}{2}$ и (3,3) и (3,4) вводятся в (3,1) и (3,2). Преобразование дает

$$v_i\left(t+\frac{\Delta t}{2}\right)=v_i\left(t-\frac{\Delta t}{2}\right)+m^{-1}F_i\left[x_i(t),\ldots,x_N(t),\ v_i(t)\right]\Delta t, \qquad (3,5)$$

$$x_i(t+\Delta t)=x_i(t)+v_i\left(t+\frac{\Delta t}{2}\right)\Delta t, \quad i=1,\ 2,\ .\ .,\ N. \qquad (3,6)$$

Исходя из полного набора положений $x_i(t)$ в выбранный момент времени t и соответствующих скоростей $v_i\left(t-\frac{\Delta t}{2}\right)$, машина использует (3,5), чтобы вычислить новые скорости $v_i\left(t+\frac{\Delta t}{2}\right)$, и (3,6), чтобы вычислить новые координаты $x_i(t+\Delta t)$. Процесс повторяется для получения координат при $(t+2\Delta t)$, $(t+3\Delta t)$ и т. д вместе с соответствующими скоростями. Оптимальное значение для Δt зависит от наибольшей скорости какого-либо атома совокупности.

Так, в ранних стадиях вычисления Δt мало́; после того как скорости движущихся атомов уменьшаются, Δt может быть увеличено для ускорения подсчета. Вычисление останавливается, когда можно считать, что конфигурация в достаточной мере стабилизовалась. Программа в целом будет детально описана в дальнейшем в отчете Брукхэйвенской национальной лаборатории.

Координаты и скорости всех атомов для последовательных ступеней времени накапливаются на магнитной ленте и могут быть по желанию напечатаны. Положения выбранных атомов могут также появляться в виде пятен на экране катодной трубки. Изображения, следующие одно за другим, могут быть запечатлены на неподвижных кадрах, перемещая которые после каждой записи можно создать движущийся фильм.

4. СТАТИЧЕСКИЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

Желательно знать конфигурацию различных дефектов решетки, которые могут быть включены в нашу модель, а также их устойчивость. Соответственно этому было проведено несколько пробегов машины для «статических» вычислений. Они проводились следующим образом. Возможные равновесные конфигурации вначале находились из простых соображений, в соответствии с ними брались исходные координаты. Все атомы принимались покоящимися, но в случае, когда конфигурация обладала симметрией, одному из атомов придавалась очень небольшая начальная скорость, чтобы нарушить симметрию, не внося в то же время ощутимой кинетической энергии.

Тем самым избегались ложные равновесия, соответствующие «мертвой точке». Исходя из этих начальных условий, машина вычисляет движения атомов, пока не будет достигнуто статическое состояние, соответствующее равновесию. Обычно, чтобы ускорить достижение равновесия, вводили искусственное затухание (полагая кинетическую энергию всех атомов равной нулю каждый раз, когда общая кинетическая энергия достигает максимума).

Вакансии выглядят совершенно нормально. Были испробованы все три вида потенциала, но в случае *2* и *3* необходимые вычисления, чтобы приблизиться к равновесию, оказывались довольно долгими. Качественно поведение во всех трех случаях одинаково, лишь величина релаксации наибольшая для случая *3* и наименьшая — для *1* (рис. 3). Ближайшие соседи релаксируют внутрь, т. е. смещаются к центру вакансии на малую

величину 1,5% от равновесного расстояния в случае потенциала *1*, на 2,5% — в случае потенциала *2* и на 3,2% — в случае потенциала *3*. Атомы второго круга, а также и более дальние, взятые в направлениях кубических осей или в ближайших к ним, релаксируют, наоборот, слегка наружу. Процентное смещение атомов второго круга составляет около $^1/_{12}$

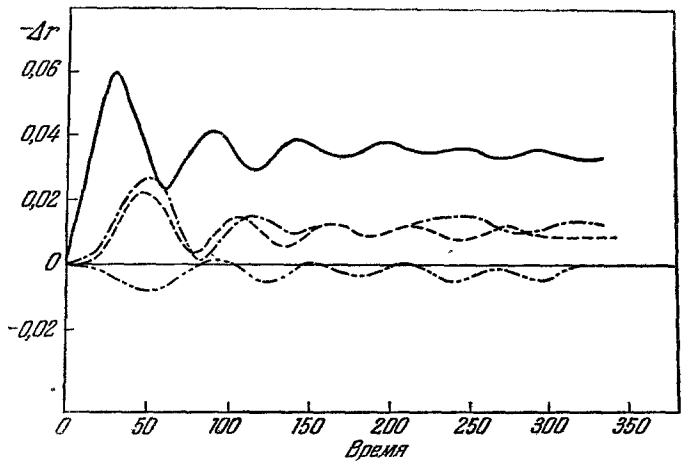

Рис. 3. Релаксация вокруг вакансии (принят потенциал *2*).

от смещения ближайших соседей. Эта явно аномальная релаксация уже была ранее найдена другими авторами[2] и легко объяснима, исходя из соображений геометрии решетки. Непосредственным следствием этого является то, что поле напряжений на некотором расстоянии от вакансии не может быть представлено как поле точечной особенности в изотропном упругом континууме. Требуется упругий континуум кубической симметрии; ту его особенность, что релаксация вдоль направлений осей куба идет наружу от центра, следует рассматривать как выражение анизотропного характера среды.

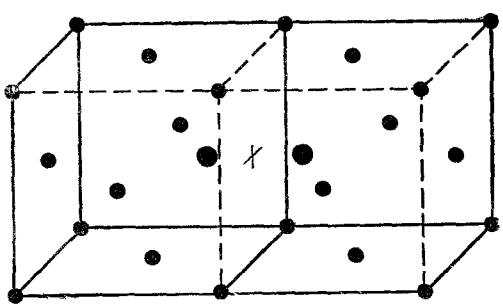

Рис. 4. «Щелевая» конфигурация промежуточного атома, оказывающаяся устойчивой. Релаксация соседних атомов не показана.

Промежуточный атом тщательно исследовался с помощью потенциала *2*; было найдено, что он не останавливается в центре кубической ячейки, но образует то, что можно назвать щелевой (*split*) конфигурацией, т. е. он вместе с другим атомом занимает один из узлов решетки, располагаясь симметрично так, что ось пары направлена вдоль оси куба.

Рис. 4 изображает этот случай щелевой конфигурации в гранецентрированной решетке. При использовании потенциала *2* расстояние между атомами пары приблизительно равно 1,2 (в единицах, при которых нормальное расстояние равно 2). Возможность такого расположения промежуточного атома в меди была указана еще Хантингтоном и Зейтцем[3], хотя ее стабильность не была установлена до сих пор. Недавно Джонсон и др.[4] также показали ее стабильность в модели, довольно сход-

ной с нашей. Следует упомянуть, что существуют три возможные ориентации такой промежуточной группы у каждого узла решетки. Их симметрия только тетрагональная, и они должны давать начало неупругим резонансным эффектам.

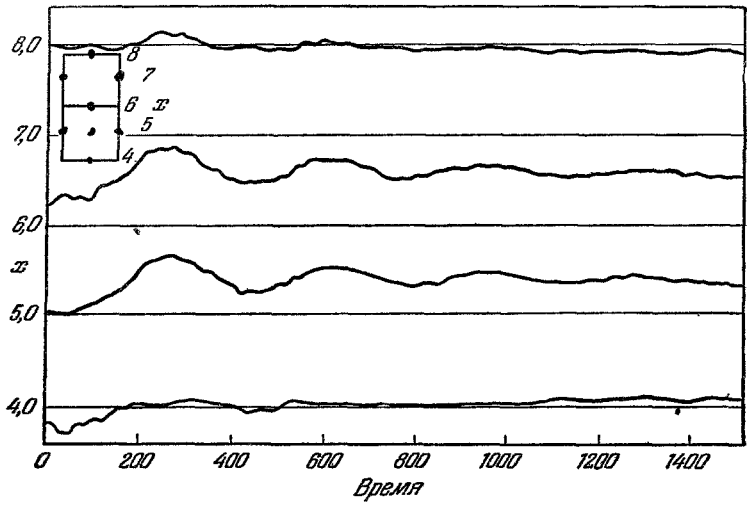

Рис. 5. Промежуточный атом; релаксация начинается от положения в центре куба.

Устойчивость такого положения промежуточного атома была продемонстрирована путем двух вычислений. Первоначально атом был помещен в центре куба с релаксацией его соседей, в соответствии с нашей первой оценкой стабильной позиции промежуточного атома. Вычисление на машине показало (рис. 5), что атом быстро двигается прочь из центра по направлению к одному из соседних атомов, выбор которого определен малым

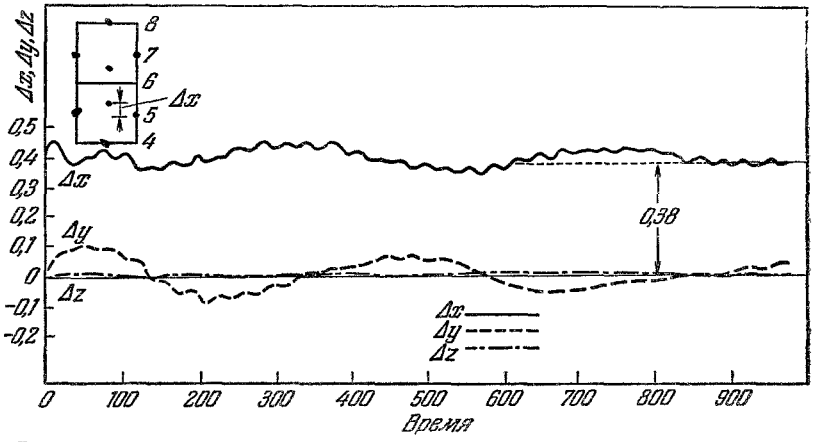

Рис. 6. Промежуточный атом; принятая конфигурация стабильна.

отклонением от симметрии в начальных условиях, и устанавливается вместе с этим атомом в щелевой конфигурации. Позднее, для пробы, щелевая конфигурация была принята в качестве исходного состояния, ей было придано небольшое возмущение, после чего был сделан долгий

пробег машины (рис. 6). Этот опыт также показал полную устойчивость щелевой конфигурации и дал точные значения величины релаксации окружающих атомов. Как мы увидим в следующем разделе, значительное число динамических экспериментов также приводит к появлению промежуточных атомов, и во всех случаях они оказываются в щелевой конфигурации.

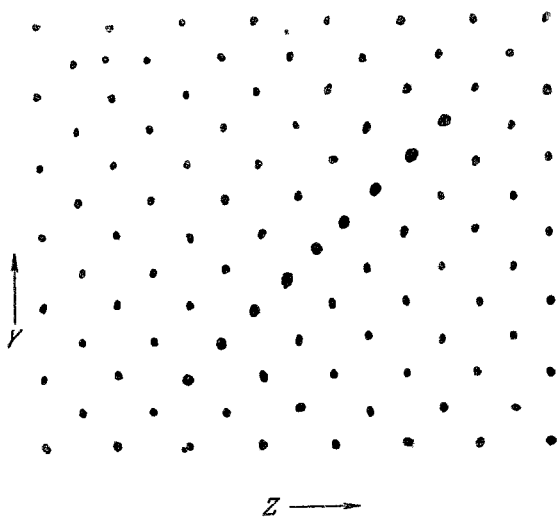

Рис. 7. Кроудион.

Проведенные вычисления еще не являются окончательным доказательством того, что не существует других устойчивых конфигураций для промежуточного атома, и, действительно, некоторые результаты экспериментов с медью пытались интерпретировать как указывающие на стабильность конфигурации кроудиона (рис. 7).

Мы подвергли испытанию стабильность кроудиона в нашей модели путем двух приемов статических вычислений, используя потенциал 2. В обоих случаях кроудион был образован путем вдвижения дополнительного промежуточного атома в цепочку ⟨110⟩ и перемещения трех атомов с каждой стороны вдоль линии ⟨110⟩ с последовательно уменьшающимся относительным смещением. При этом всем восьми атомам, находящимся на направлениях ⟨110⟩ и соседних с включенным, дана релаксация наружу в сторону от последнего, чтобы обеспечить возможно меньшую энергию. В одном из проведенных вычислений экстра-атом был включен посередине между двумя занятыми узлами решетки, так что релаксация была симметричной относительно этой точки. Это расположение можно было бы назвать объемно(*space*)-центрированным кроудионом. Во втором вычислении, относящемся к расположению, которое можно было бы назвать позиционно(*site*)-центрированным кроудионом, экстра-атом размещается по одну сторону какого-либо узла решетки, а релаксация распределяется симметрично по обе стороны от этого узла. Однако оказывается, что оба кроудиона неустойчивы и исчезают, переходя в щелевую конфигурацию промежуточного атома путем вращения пары атомов, ближайших к центру. Исчезновение кроудиона происходит, однако, крайне медленно, и это указывает, что потенциальная энергия имеет довольно плоский ход вблизи этих кроудионных

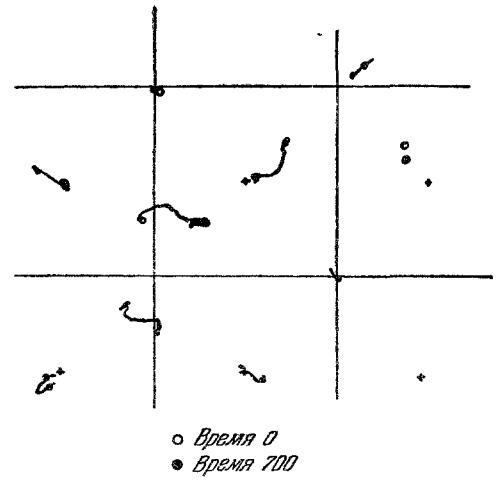

Рис. 8. Распад кроудиона, переход промежуточного атома в щелевую конфигурацию.

конфигураций. Мы считаем, что кроудион неустойчив в данной модели; тем не менее не исключено, что небольшое изменение силового закона может сделать его устойчивым (рис. 8).

Необходимо также знать, какие пары Френкеля будут стабильны. Соответственно тому была выполнена серия пробегов машины с потенциалом 2 для решения статической задачи устойчивости френкелевских пар с различным взаимным удалением дефектов. Результаты для пар в плоскости ⟨100⟩ показаны на рис. 9. Положение промежуточного атома в щелевой конфигурации в нижнем левом углу рисунка принято фиксированным. Узлы решетки вокруг промежуточного атома (пары), в которых вакансия оказывается стабильной, обозначены S. Узлы, в которых вакансия с промежуточным атомом представляет неустойчивую френкелевскую пару, обозначены U. Все позиции внутри пунктирной линии неустойчивы, вне линии их следует считать устойчивыми. Как видно из рисунка, расстояния, необходимые для обеспечения стабильности, неожиданно велики, особенно в направлении наиболее плотно упакованного ряда. Размеры области неустойчивости имеют существенное отношение к вопросу о пороговом значении энергии повреждения, а также к процессам отжига, в которых происходит рекомбинация мигрирующих промежуточных атомов с вакансиями.

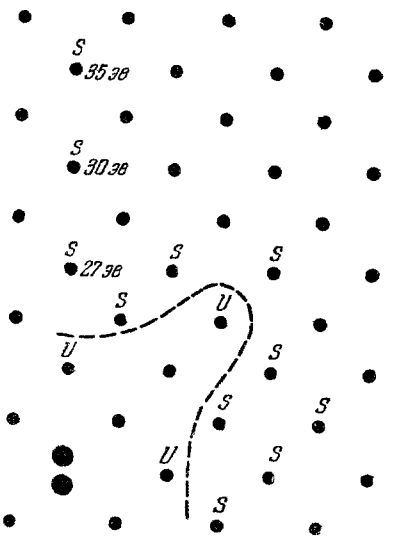

Рис. 9. Стабильность френкелевских пар в ⟨100⟩-плоскости меди.

Промежуточный атом в левом нижнем углу Пунктирная линия отделяет область устойчивости вакансий от области неустойчивости. Цифрами показаны пороговые значения энергии для динамического образования трех пар промежуточный атом—вакансия

5. ДИНАМИЧЕСКИЕ ЭФФЕКТЫ

А. Описание явлений

На рис. 10 показаны траектории движений, происходящих в плоскости y—z, когда один атом (A) приходит в движение с кинетической энергией 40 *эв* в направлении, лежащем в этой плоскости под углом 15° к оси y.

Начальные положения атомов в плоскостях, находящихся непосредственно выше и ниже главной, показаны самыми маленькими точками. Более крупные точки показывают атомы главной плоскости в момент времени 0, еще бо́льшие черные кружки изображают положения тех же атомов в момент времени 99 (единица времени — $3{,}27\cdot10^{-15}$ *сек*). Большие светлые кружки изображают атомные размеры, определенные по наименьшему расстоянию сближения при лобовом столкновении между атомом с энергией 40 *эв* и покоящимся. Атомы, для которых траектория не указывается, испытывают только незначительные смещения. Столкновения замещения можно видеть в B и C, вакансия остается в A, а промежуточный атом образуется в D. Последний оказывается в обычной щелевой конфигурации (см. рис. 4), причем атом с координатами $y=1, z=4$ смещается вверх от своего первоначального положения и указанная позиция разделяется между обоими атомами. Также замечательными являются цепочки строго фокусированных столкновений вдоль направлений ⟨110⟩ и ⟨100⟩, сюда относятся AD, AB, FG, BH и т. д. Фокусировка ⟨110⟩ по существу та, которая была предсказана Силсби[5], но ⟨100⟩ происходит только вследствие

влияния соседних рядов атомов и не была предвидена ранее. Атомы вдоль всех рядов, кроме линии AD, находятся в фазе возвращения к местам, близким к их нормальным позициям. Хотя релаксация еще не закончилась вполне к моменту времени 99, данный опыт, так же как и другие, убеждает, что дальнейшая релаксация не должна изменить основное расположение, и конечная конфигурация не будет отличаться от той, которая видна на рис. 10. Конечный результат этого случая составляет два

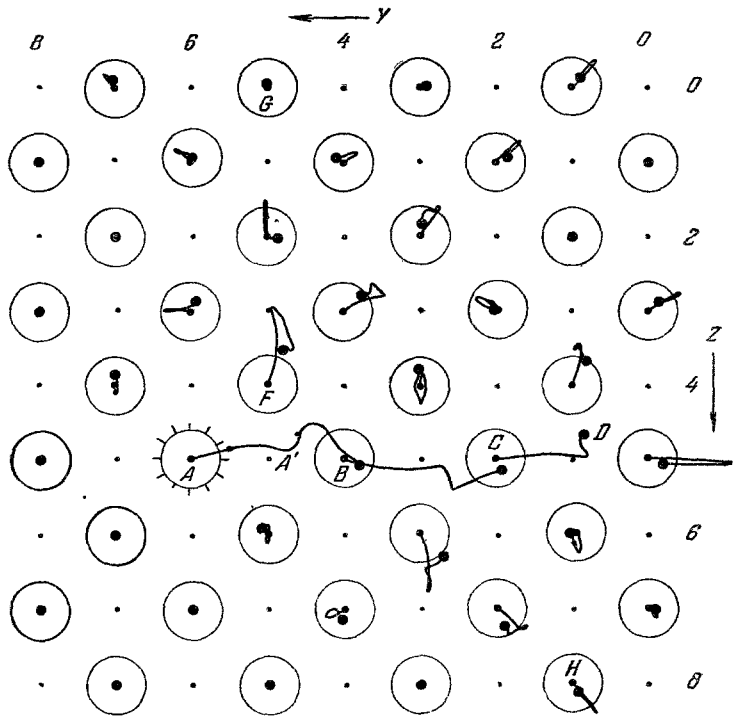

Рис. 10. Траектории атомов, созданные ударом в 40 *эв* в плоскости ⟨100⟩.

Первичный атом в A; направление удара составляет 15°с осью y. Большие кружки показывают начальные положения атомов в плоскости, маленькие точки — начальные положения в плоскости, лежащей ниже Вакансия образуется в A,промежуточный атом (в щелевой конфигурации) в D Время равно 99

замещения и образование двух френкелевских пар. Хотя рис. 10 и не передает скоростей, следует указать, что область скоростей довольно велика. Первично выбитый атом, имевший в A скорость 40 *эв*, снижает ее до 19 *эв* перед точкой, обозначенной A' (где он испытывает почти лобовое столкновение с B), и эта скорость падает до 0,1 *эв* сразу за точкой A'.

Ближайшие два рисунка показывают результаты толчка, превышающего порог и происходящего в направлении, удаленном от осей симметрии, а именно составляющем 10° с направлением ⟨011⟩ в плоскости $x=2$. В первом из этих рисунков использовался кристаллит B, во втором — большой кристаллит C. Показаны орбитальные траектории в плоскости $x=2$; все они получены с потенциалом *2*. Рис. 11 показывает толчок в 100 *эв* — эффект, который из-за того, что был взят большой объем, целиком в нем содержится. Интервал времени взят равным 200 единицам. Первичный получивший толчок атом находится в V_1. Вакансии образуются в V_1 и V_2, а два промежуточных атома в несколько более удаленных точках

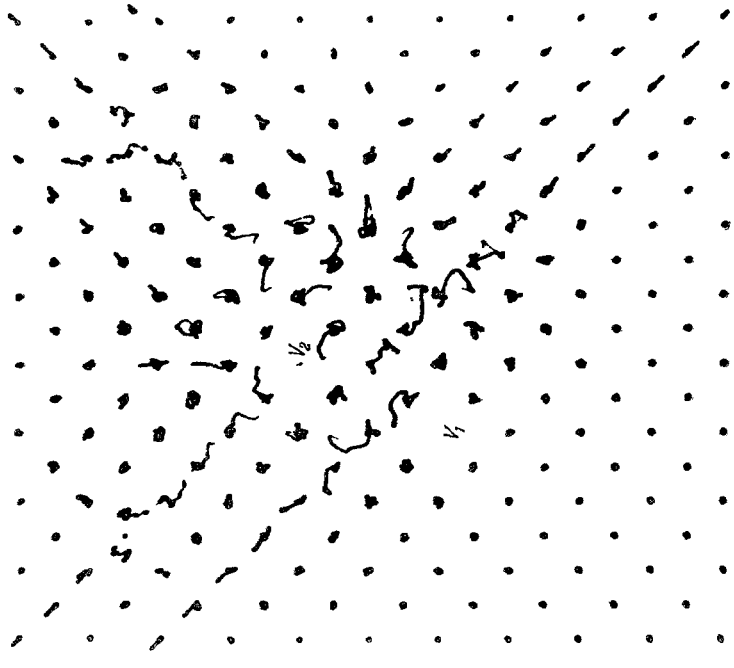

Рис 11. Толчок в плоскости ⟨100⟩ с энергией 100 *эв*, под углом 10° к [011].

Показаны пути движения атомов за время 200 единиц (прибл) Толчок начинается в точке V_1

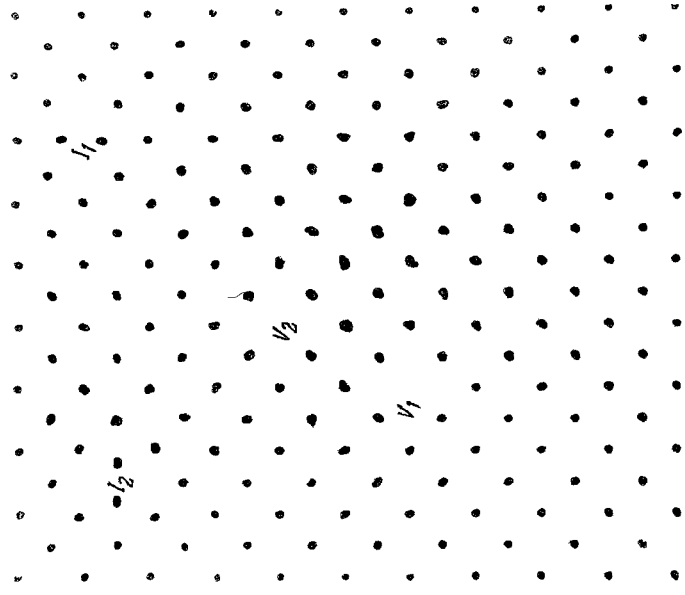

Рис. 12. Тот же случай, что и на рис. 11, но движения даны за время от 200 до 703 единиц.

Образовались две вакансии V_1 и V_2 и два устойчивых промежуточных атома I_1 и I_2

I_1 и I_2*). Видно двенадцать замещений. Рис. 12 показывает ту же плоскость, что и на рис. 11, в момент времени 704, когда движения закончились. Картина возникших дефектов здесь устанавливается с полной ясностью, оставшиеся атомные колебания весьма ограниченны. Вакансии и промежуточные атомы обозначены так же, как на рис. 11. На рис. 13 показаны орбиты, созданные первичным атомом, получившим толчок с энергией 400 *эв*, направленный первоначально под углом в 10° по отношению

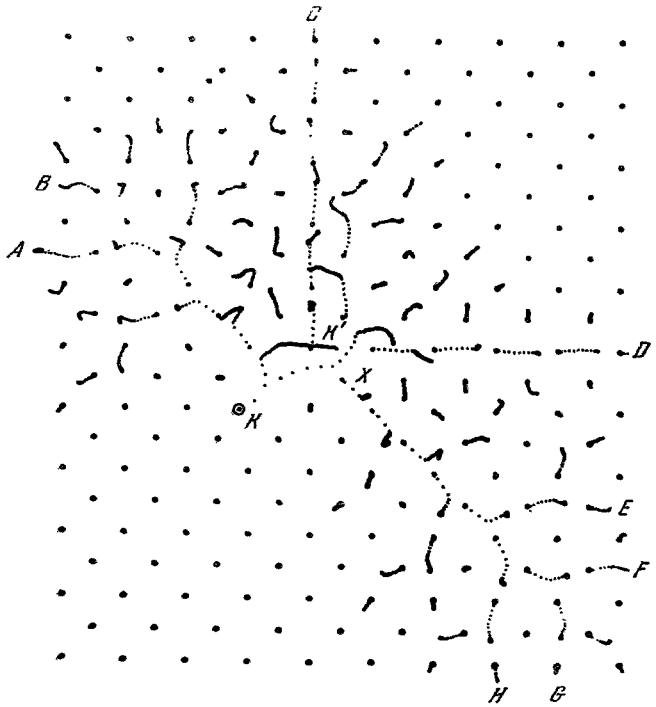

Рис. 13. Толчок в плоскости ⟨100⟩ с энергией 400 *эв*, под углом 10° к оси [011].

Показаны траектории атомов ко времени 45 ед. Первичный атом начал движение в K, переместился в K'. К к концу взятого промежутка времени цепочки столкновений A, B, ., H еще находятся в состоянии активного движения.

к ⟨011⟩. Первичный атом из K переходит в K'. Картина относится к моменту 45, к этому времени движения распространились до границ блока, а вся конфигурация еще довольно далека от равновесия.

Случай 400 *эв* на рис. 13 в действительности превышает возможности нашего счетного метода. Однако он представляет весьма показательный пример случая повреждения с промежуточной энергией.

Рассматривая энергии главных орбит в конце пробега и привлекая опыт, полученный из экспериментов с низшими значениями энергии, возможно дать оценку конечной конфигурации. Конечно, она представляет собою не более, чем допустимую догадку, и многие частности, возможно, потребуют пересмотра, когда будут доступны более мощные счетные методы. Тем не менее общий характер повреждения может быть найден достаточно корректно. Может быть проанализировано действие, сохраняющееся

*) Точки I_1 и I_2 обозначены лишь на рис. 12. (*Прим. ред.*)

к концу вычисления в ряде цепочек соударения. Цепи ⟨100⟩ еще остаются активными в пунктах A, B, C, D, E, F, G и H.

Определяя кинетическую энергию в этих точках и принимая, что фокусированная вдоль ⟨100⟩ цепочка теряет 7 *эв* на ступень, можно для оценки положить, что до 8 промежуточных атомов могут быть образованы вне основного тела кристаллита, как это и показано на рис. 14. В дополнение к ним 3 атома, по-видимому, еще формируются внутри тела в узлах, также обозначенных на рис. 14. Также должно образоваться

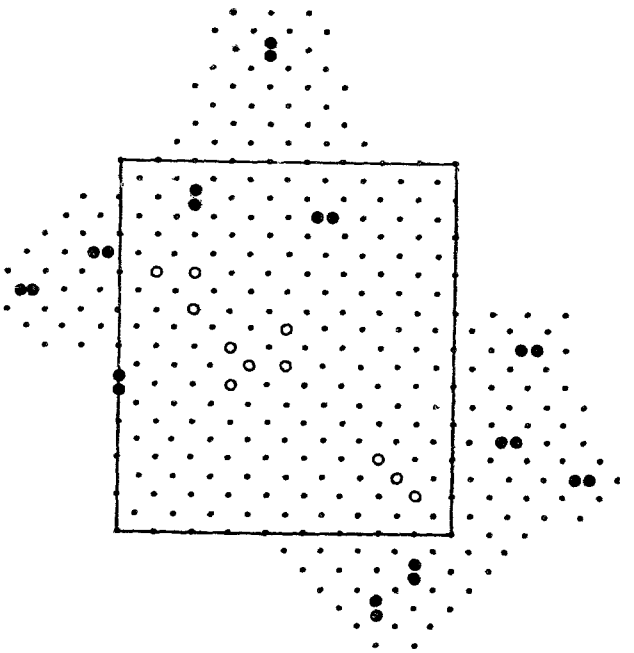

Рис. 14. Оценка, исходящая из случая, представленного на рис. 13, приводит к 11 вакансиям (изображенным светлыми кружками) и к 11 промежуточным атомам (двойные черные кружки).

Границы кристаллита, использованного в опыте (рис 13), показаны на чертеже Распределение вакансий, как оно изображено на рисунке, может быть неустойчивым

всего 11 вакансий. Позиции некоторых из них очевидны, другие найдены путем экстраполяции, и эти места обозначены пустыми кружками на рис. 14. По-видимому, происходит еще около 39 замещений. Вполне возможно, что некоторые из наиболее близко примыкающих друг к другу вакансий будут сразу же перестраиваться (что, например, может произойти в случае триваканcии в соседних узлах; см. справа внизу), однако в данное время едва ли возможны какие-либо отдельные заключения на этот счет.

Конфигурация образовавшихся вакансий и промежуточных атомов замечательна в нескольких отношениях. Вакансии сидят близко к месту начального толчка, промежуточные же атомы отстоят довольно далеко от них. При этом цепочки соударений ⟨110⟩ не играют той исключительной роли, как в случаях столкновений с малой начальной энергией, рассмотренных выше. Причину этого следует видеть в том, что в данном случае энергии намного превышают предел фокусировки, существующий для рядов атомов ⟨110⟩, заставляя их разветвляться по ⟨100⟩-рядам, для которых энергия оказывается равной или меньшей порогового значения.

Особенно очевидный пример этого представляет цепочка, начинающаяся в точке x и движущаяся к нижнему правому углу рисунка.

Кинетическая энергия в x равна 125 *эв*. Действие вдоль этой линии напоминает во многих отношениях бринкменовские пики смещения, хотя здесь нет ничего, что напоминало бы плавление или турбулентное перемешивание, предсказанное ранее.

Заметьте особенно три вакансии, расположенные в линию, и пять промежуточных атомов снаружи их. Становится ясным, что при такой энергии будут образовываться стабильные скопления вакансий и промежуточных атомов любого вида, даже тогда, когда имеет место лишь незначительный отжиг.

Б. Фокуссоны и динамические кроудионы

Была также произведена серия толчков в плотноупакованных направлениях ⟨110⟩ или близких к ним. Было найдено, что при низких энергиях в этих направлениях происходит ясно выраженная фокусировка, а при больших энергиях дефокусировка, которая, однако, сменяется фокусировкой, когда цепочка потеряет достаточно энергии. Если направление

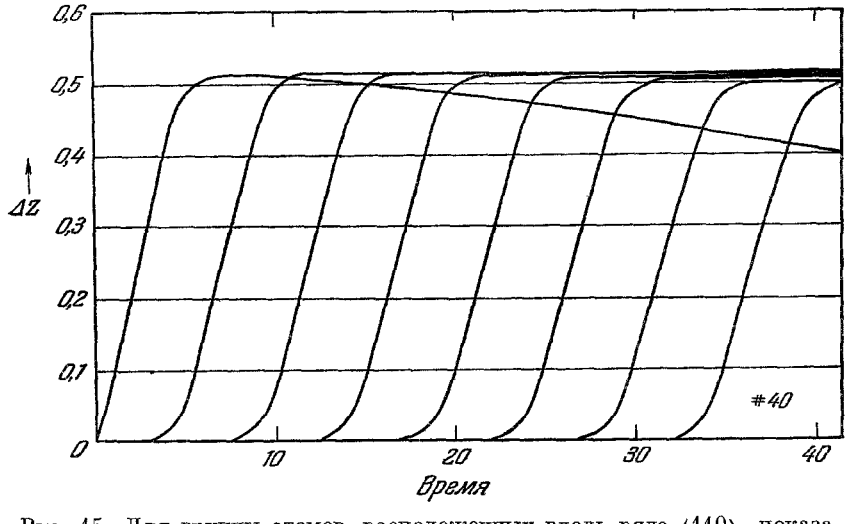

Рис. 15. Для группы атомов, расположенных вдоль ряда ⟨110⟩, показано их смещение во времени в начальной стадии.
Энергия, сообщенная первому атому цепочки, равна 25 *эв*.

близко к ⟨110⟩, эти цепочки теряют энергию лишь весьма медленно со скоростью приблизительно 2/3 *эв* на каждое соударение при энергиях от трех до нескольких сотен *эв*. Следовательно, их длина должна быть столь велика, что они не могут быть остановлены внутри рассматриваемого нами блока — кристаллита. В противоположность тому, что ранее предполагалось, пороговая энергия для получения устойчивого смещения оказалась достаточно малой. Так как большая длина цепей создает трудности, мы не смогли определить точное значение этого порога, но лучшие оценки, сделанные с использованием потенциала *2*, показали, что они меньше 35 *эв* и, вероятно, лежат вблизи 25 *эв*. Так как ⟨100⟩-порог также находится около 25 *эв*, это означает, что оба эти направления существенны при бомбардировках вблизи порога. Также очевидно, что промежуточные атомы, создаваемые в ⟨100⟩-цепочках, будут находиться далеко от начала цепи,

по крайней мере на 10 атомных расстояниях, если энергия удара близка к порогу, и не менее, чем на 150 атомных расстояниях при 100 *эв*. Рис. 15 передает смещения по оси z как функцию времени для цепочки следующих друг за другом атомов, причем первый получил 25 *эв* как раз точно вдоль ⟨110⟩. Каждый атом, пройдя половину расстояния $\left(\Delta z = \frac{1}{2}\right)$ между ним и его соседом, движется далее лишь очень мало, прежде чем он остановится, и релаксация после этого протекает крайне медленно. Первый атом в отличие от остальных релаксирует по направлению к своей первоначальной позиции.

Аномальное поведение этого атома находит объяснение в том, что атом, ему предшествующий в данном ряду, не перемещается значительно, и таким образом возвращающая сила, действующая со стороны второго атома цепочки, оказывается несбалансированной. Второй же и следующие за ним атомы задерживаются в седловидной точке, и трудно заключить с достоверностью из проведенного вычисления, произойдет ли релаксация вперед или назад. Во всяком случае можно ожидать, что несколько бо́льшая начальная энергия вызвала бы релаксацию вперед, а если бы это произошло, то на некотором расстоянии вдоль цепи образовался бы промежуточный атом, а на месте второго атома осталась бы вакансия.

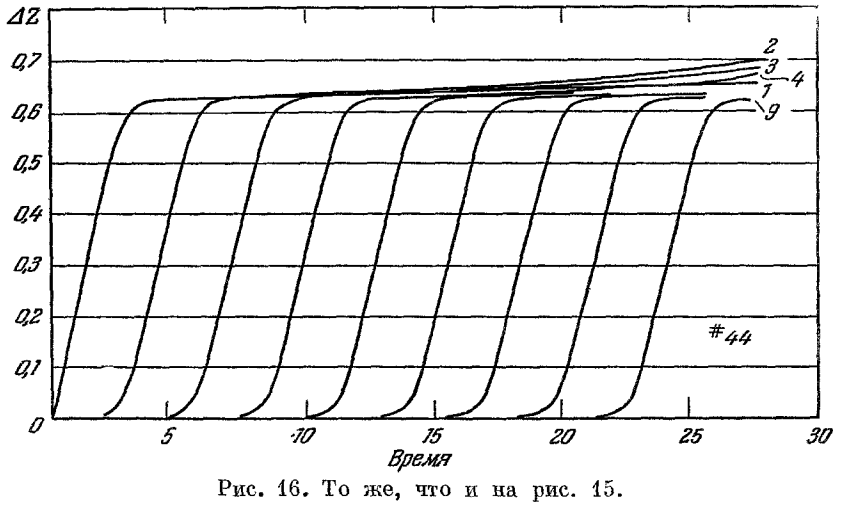

Рис. 16. То же, что и на рис. 15.
Толчок по оси ⟨110⟩ с энергией 100 *эв*

В некоторых других случаях наблюдалось образование вакансии также на месте третьего атома цепи. Случай более сильного удара, создающего прямым путем смещенный атом, показан на рис. 16. Он вполне соответствует случаю, который изображен на рис. 15, за исключением того, что первичному атому задана кинетическая энергия в 100 *эв*. Теперь каждый из атомов перемещается далее средней точки уже в начальный момент удара, и последующая релаксация происходит в прямом направлении. В это же время вакансия образуется на месте первого атома. Промежуточный атом может возникнуть на расстоянии до 150 атомных промежутков.

Рассмотрим еще серию операций, выполненных при направлении начальной скорости, близком к кубической оси.

В одном из них атому с координатами 226 (плоскость $x = 2$) первоначальный толчок в 35 *эв* дан в направлении, составляющем 1° с осью y. Общий результат — образование пары Френкеля после двух замещений, причем

вакансия образовалась на y-координате, равной 2, а промежуточный атом оказался в щелевой конфигурации, ориентированной параллельно оси y и центрированной около координаты 286; помогающее этому фокусирование удара по кубической оси видно из рис. 17, который хорошо передает происходящий вдоль оси y перенос как вещества, так и энергии в ⟨100⟩-цепочке атомов.

Аналогичное этому действие вдоль ⟨110⟩ получило название «динамического кроудиона» и, следовательно, можно видеть, что динамический кроудион, если удержать это название в данном случае, так же хорошо

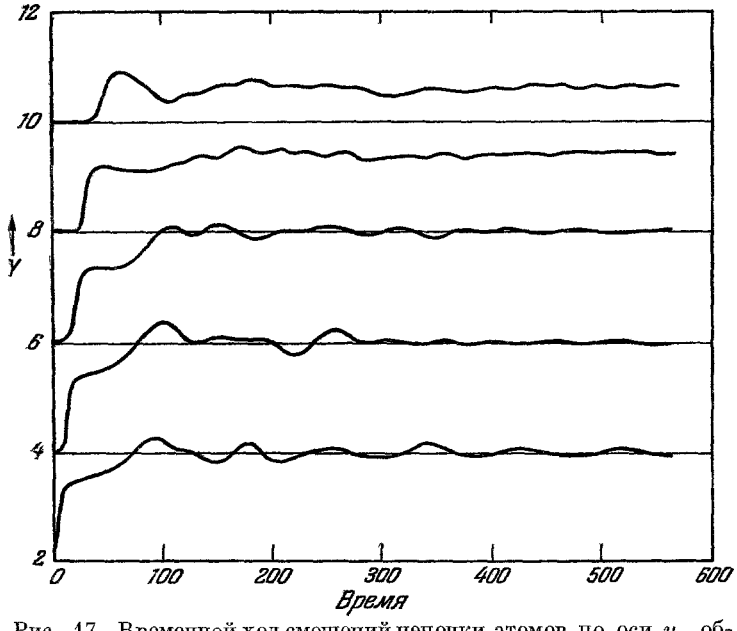

Рис. 17. Временной ход смещений цепочки атомов по оси y, образующих промежуточный атом в щелевой конфигурации около координаты $y=10$.

наблюдается и по оси ⟨100⟩. В случае ⟨100⟩ потеря энергии происходит быстрее, чем в случае ⟨110⟩. Так, при хорошо сфокусированной цепочке вдоль ⟨100⟩ затухание энергии происходит со скоростью 7—8 *эв* на столкновение. В этом случае соседние атомы, кроме тех, которые принадлежат к главному направлению удара, не отходят далеко и возвращаются к своим первоначальным местам в решетке.

В. Цепочки соударений

Одной из наиболее удивительных особенностей приводимых в этой статье графиков орбит атомов является ясная тенденция предпочтительного распространения энергии вдоль некоторых рядов атомов таких, как плотно упакованные ряды ⟨110⟩ и кубические ⟨100⟩.

Выше упоминалось, что первый эффект ⟨110⟩ предсказал Силсби, который впервые указал, что в изолированной цепочке из равноотстоящих твердых шаров должна происходить фокусировка удара. Если удар первого шара о второй происходит по линии центров, образующих угол ϑ_1 с осью цепи, то второй шар полетит под углом ϑ_2, определяемым уравнением

$$\vartheta_2 = \arcsin\left(\frac{s}{D}\sin\vartheta_1\right) - \vartheta_1,$$

где s — расстояние между центрами шаров, D — диаметр. Если сферы расположены достаточно близко друг к другу, то ϑ_2 будет меньше ϑ_1, и вообще ϑ_{i+1} будет меньше ϑ_i. При достаточно малом ϑ_i уравнение (5,6) приводится к

$$\vartheta_2 = \left(\frac{s}{D} - 1\right)\vartheta_1, \tag{5,2}$$

а фокусировка происходит, если $\frac{s}{D} < 2$. Если атомы представляют собой сжимаемые шары, то в первом приближении можно считать их за несжимаемые, с диаметром, равным расстоянию наибольшего сближения при лобовом столкновении. Считая, что атом, несущий кинетическую энергию E, сталкивается с равным ему по массе атомом, и принимая экспоненциальную форму отталкивательного потенциала

$$\varphi = Be^{-\beta r},$$

находим «диаметр несжимаемого шара» с энергией E:

$$D = \left(\frac{1}{\beta}\right)\ln\left(\frac{2B}{E}\right). \tag{5,3}$$

Степень фокусировки может быть условно обозначена фокусирующим параметром λ, определенным как отношение ϑ_2 к ϑ_1:

$$\lambda = \frac{\vartheta_2}{\vartheta_1}. \tag{5,4}$$

Для малых углов из (5,2) получаем

$$\lambda = \frac{s}{D} - 1,$$

где D дано уравнением (5,3).

В более отвечающей действительности модели, например, модели, принятой в настоящих вычислениях, ряды атомов не изолированы, но вместе с соседними рядами образуют общую пространственную решетку. Следует иметь в виду также, что движущийся атом находится в постоянном взаимодействии с ближайшими соседями в своем ряду и, следовательно, невозможно строго провести разделение соударения на стадии до удара и после него. Движущийся атом следует по кривой траектории, теряя постепенно свою скорость, ударяемый атом также удаляется по кривой траектории, постепенно набирая скорость. Поэтому чрезвычайно интересно, что вычисление приводит к результатам соударения, имеющим столь близкое качественное сходство с цепями Силсби. Чтобы еще надежнее проверить это сходство, а также чтобы попытаться найти такой способ характеристки наблюдаемых цепей, чтобы можно было сложное явление повреждения разложить на простые элементы, было предпринято количественное исследование цепей, возникающих в счетных операциях. Цепь характеризовалась кинетической энергией E_i и углом ϑ_i между осью цепи и касательной к орбите движущегося атома на каждой i-й ступени ($i = 1, 2, 3, \ldots$) цепи. E_i всегда выбиралось как кинетическая энергия одного данного атома в точке ее максимума, и угол ϑ_i брался также в этой точке. Это казалось наилучшим компромиссом между требованием, чтобы предшествовавшее соударение было уже окончено, но новое еще не началось. Если угол цепи при следующей ступени будет ϑ_{i+1}, то удобно определить параметр фокусировки $\lambda(E_i)$ как

$$\lambda(E_i) = \frac{\vartheta_{i+1}}{\vartheta_i}. \tag{5,5}$$

Рассматривая главную фокусированную цепочку ⟨110⟩ (все наши вычисления получены с потенциалом 2), ограничиваясь случаями, где ϑ_i было

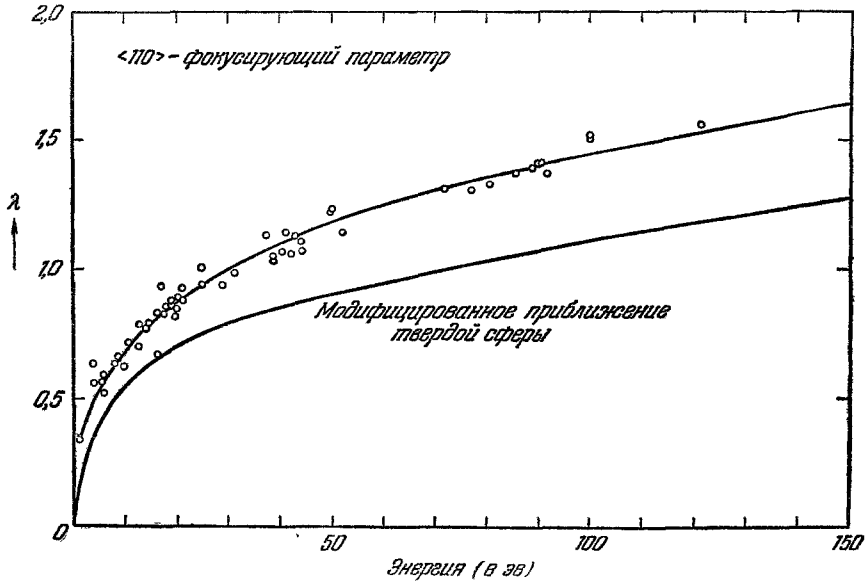

Рис. 18. График зависимости λ от E для направления ⟨110⟩.

менее 20°, и исключая из рассмотрения поверхностные атомы, можно было найти λ (E_i) для большого интервала значений энергии.

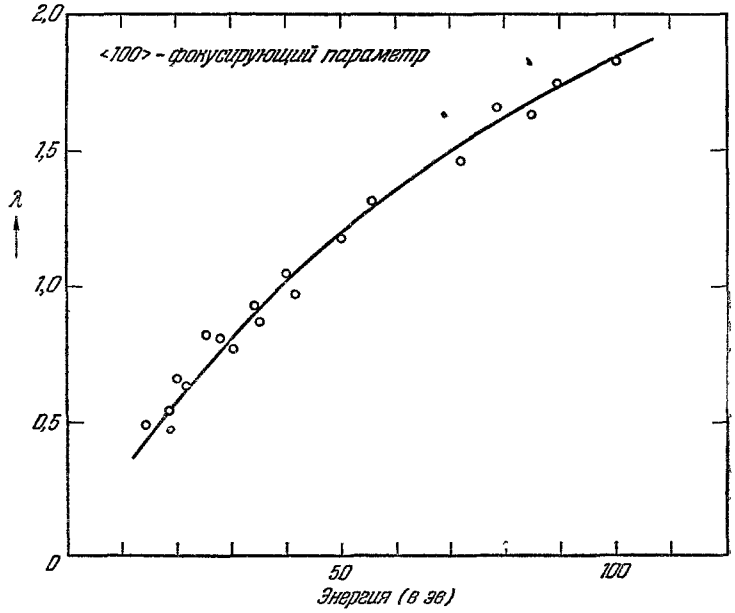

Рис. 19. График зависимости параметра λ от энергии E (см. текст). Направление ⟨100⟩.

Точки нанесены на график (рис. 18). Они лежат на довольно хорошо выраженной кривой. Наблюдается лишь слабая зависимость λ от ϑ_i;

большую часть рассеяния точек около кривой следует скорее приписать несколько произвольному допущению, что цепочка, создаваемая различными способами, может определяться всего двумя параметрами ϑ и E, а также в меньшей мере ошибкам ветвления. Из рис. 18 видно, что $\lambda = 1$ при $F \simeq 30$ *эв*, таким образом цепочки фокусируются до 30 *эв*. В случае дефокусированной цепочки углы увеличиваются и происходит более быстрая потеря энергии. В цепочке ⟨110⟩ потеря энергии при каждой ступени была найдена равной приблизительно (в *эв*)

$$\Delta E_i = \frac{2}{3} + E_i \sin^2(\vartheta_i + \vartheta_{i+1}). \qquad (5,6)$$

По мере возрастания угла отдача энергии возрастает, пока энергия цепи не упадет до значения, при котором цепь фокусируется. Ее углы тогда

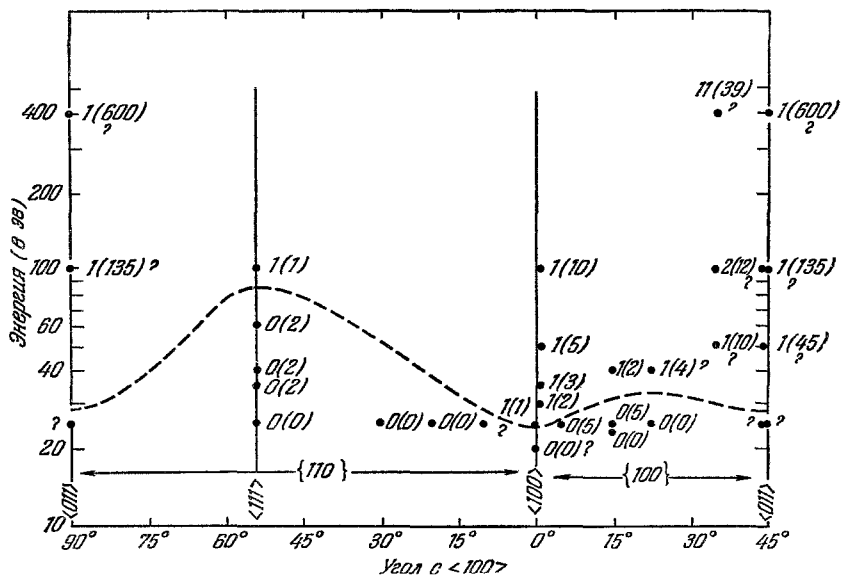

Рис 20 Цифры на диаграмме показывают число смещений (первая цифра) и замещений (вторая цифра в скобках), образующихся в результате удара с энергией E (ось ординат), под углом к оси куба ⟨100⟩ (ось абсцисс).

Пунктирная линия ограничивает область энергий и углов, вызывающих только замещения без образования смещенных атомов На диаграмме нанесены как рассчитанные по формулам, так и «экспериментально» полученные точки.

быстро приблизятся к нулю, и цепочка продолжится на расстояние, определяемое первым слагаемым правой части (5,6). Это последнее возникает потому, что даже в наиболее совершенно фокусированной цепочке атомы должны прокладывать себе путь и терять при этом часть своей энергии. Значение 2/3 *эв* на ступень оказалось хорошим приближением для отталкивательного потенциала 2 при малых углах и для энергий между 3 и 400 *эв*.

Атомные ряды ⟨100⟩ имеют в два раза более широкие промежутки, чем ⟨110⟩. Модифицированная теория удара твердых шаров предсказывает дефокусировку для всех энергий выше 5,5 *эв*. В действительности в этих линиях ⟨100⟩ наблюдаются много более сильные фокусирующие эффекты, и из рис. 10 видно, что это происходит вследствие ограничивающего действия, создаваемого соседними линиями. Поэтому неправильным было бы рассматривать ⟨100⟩-линии как изолированные.

Фокусировка многих ⟨100⟩-цепочек была исследована в наших вычислительных экспериментах и было найдено, что они на каждой ступени (звене) могут характеризоваться параметром λ, определенным тем же способом, как и в случае ⟨110⟩-цепочки. Результаты представлены на рис. 19. Некоторое рассеяние точек имеется и здесь, что объясняется прежней причиной. В общем, фокусировка происходит, когда кинетическая энергия оказывается менее 40 *эв*, а дефокусировка начинается при энергиях выше этого значения. Когда энергия превышает порог фокусировки, λ в случае ⟨100⟩-цепочки растет быстрее, чем в случае ⟨110⟩. На рис. 19 приведены случаи, при которых углы ϑ не превосходили 20°, но бо́льшая часть их была менее 3°. Так же как и в случае ⟨110⟩, внутри этой области углов не было замечено какой-либо систематической зависимости λ от ϑ_i. Все результаты суммированы на рис. 20.

Г. Замещающие столкновения

Подсчитаем теперь число замещений, происходящих в цепочке с начальной энергией E_1 и углом удара ϑ_1. Находя λ (E_1) из кривой, проведен-

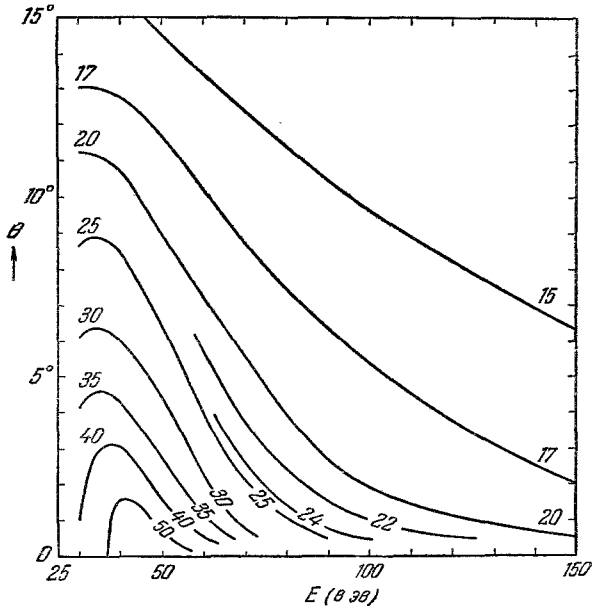

Рис. 21. Контуры показывают линии равных значений числа образующихся замещений N в цепочках ⟨110⟩ при различных значениях начальной энергии и угла удара по отношению к оси цепочки.

ной через «экспериментальные» точки на рис. 18, находим второй угол ϑ_2 цепочки по условию $\vartheta_2 = \lambda(E_1)\vartheta_1$. Используя далее (5,6), определяем потерю энергии и второе значение энергии цепочки

$$E_2 = E_1 + \Delta E_1.$$

Процесс повторяется; исходя из E_2 и ϑ_2, таким образом находятся последовательные ступени. Из проведенных до этого динамических проб было установлено, что хорошо фокусированная цепочка создает промежуточный атом (иначе говоря, переносит вещество), когда ее энергия снижается до 3 или 4 *эв*.

Пределы возможной ошибки этого значения энергии довольно велики, однако для данной цепи примем 3,5 *эв*. Определим величину N (E, ϑ) как число столкновений, необходимых для того, чтобы энергия цепочки с начальными значениями энергии E и угла ϑ (принимая $E \geqslant 30$ *эв* и $|\vartheta| < 15°$) снизилась до 3,5 *эв*. Это число —N (E, ϑ) — будет представлять не что иное, как число замещений в цепи и таким образом определять (в атомных расстояниях) отрезок между вакансией, находящейся в начале цепи, и промежуточным атомом в ее конце. Контуры постоянных значений N (E, ϑ) указаны на плоскости E — ϑ на рис. 21. Из рис. 21 следует, что длина цепей, начатых с малой энергией (около 60 *эв*), уменьшается довольно медленно с увеличением ϑ, тогда как длина более энергичных цепей падает довольно быстро по мере возрастания ϑ. Вдоль линии $\vartheta = 0$ $N(E\,\vartheta) = \frac{E_1 - E_N}{2/3}$ (см. (5,6)). Можно предсказать, например, что при 100 *эв* и $\vartheta = 0$ цепь будет проходить 146 атомных расстояний, тогда как при начальном угле $\vartheta = 1°$ она будет иметь длину только в 22 атомных расстояния. Ясно, конечно, что рассуждения, лежащие в основе рис. 21, являются весьма грубыми, но следует все же думать, что график представляет собой лучшее приближение к действительности, чем давали прежние исследования, основанные на модели несжимаемых шаров. Контуры на рис. 21 заканчиваются на 30 *эв*, так как допущения, принятые для вывода их, неприменимы к цепям, начатым с энергией, меньшей этой.

6. ВЫВОДЫ И ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Представленные здесь вычисления дают возможность заглянуть глубже, чем это возможно было когда-либо ранее, в сущность радиационного повреждения в гранецентрированных металлах при низких и средних энергиях. Следует, однако, помнить, что все полученные результаты основываются на простой модели металлической меди, которая, хотя и допустима, по-видимому, в данном случае, но окончательно еще не была установлена. С этой оговоркой могли быть выведены следующие заключения о радиационном повреждении и строении дефектов в меди:

1. Повреждение при низких энергиях состоит из образования вакансий и промежуточных атомов. Это является лишь подтверждением обычных представлений.

2. Вакансии оказываются общепринятого типа, но что касается промежуточных атомов, то они существуют в виде щелевой (парной) конфигурации (см. рис. 4). Других конфигураций промежуточного атома, которые оказывались бы стабильными, не найдено.

3. Правильное расположение атомов в пространственной решетке оказывает важнейшее влияние на характер повреждения. Появляются цепочки столкновений как по направлениям ⟨110⟩, так и по ⟨100⟩, распространяющиеся с особенно малой потерей энергии в первом из этих направлений, как это и было принято Силсби[5]. Цепи ⟨110⟩ фокусируются при кинетической энергии, меньшей приблизительно 30 *эв*, цепи ⟨100⟩ фокусируются ниже 40 *эв*. Как те, так и другие дефокусируются при бо́льших энергиях. Эти пороги оказываются неожиданно низкими.

4. Цепь с энергией выше 25 или 30 *эв* переносит не только энергию, но и вещество способом, представляющим собою нечто вроде «динамического кроудиона», и создает промежуточный атом вблизи своего конца. Была произведена оценка длины пробега различных ⟨110⟩-цепей (см. рис. 21).

5. Благодаря действию «динамического кроудиона» промежуточные атомы имеют тенденцию образовываться на некотором расстоянии от места первичного соударения, тогда как вакансии, для которых не существует

такого механизма перемещения, остаются позади, образуя часто комплексные группы. Можно ожидать, что при средних энергиях будут образовываться различные скопления вакансий или, возможно, еще более сложные конфигурации. Данные вычисления не позволили проследить за этими преобразованиями в деталях. Вопрос о существовании аморфных зон в области явлений повреждения, например предложенных Зеегером[9], пока не решен.

6. Вторым результатом существования цепочек соударения является возникновение значительно большего числа замещений по сравнению со смещениями. В соединениях или сплавах почти гомогенного строения этот эффект должен вызвать нарушение атомного порядка гораздо больше, чем следовало бы из числа смещенных атомов[10].

7. Пороговая энергия для создания одной пары Френкеля наименьшая (около 25 *эв*) в направлении ⟨100⟩ или близком к нему и, вероятно, почти столь же мала в направлениях вблизи ⟨110⟩. Значительно выше оказывается порог около ⟨111⟩, достигая здесь значения, вероятно, 85 *эв* (см. рис. 20). Это прямо подсказывает эксперименты для определения зависимости порога смещения от направления.

8. Близкие френкелевские пары в данной модели неустойчивы, и, чтобы достигнуть устойчивости по линии ⟨110⟩, пары должны быть разделены по крайней мере четырьмя атомными промежутками (см. рис. 9). Заключения эти, впрочем, должны учитывать чувствительность по отношению к небольшим изменениям принятого силового закона.

9. Толчки с энергией, близкой к пороговой, должны создавать разнообразие возникающих френкелевских пар. Объяснение Корбеттом, Смитом и Уокером[11] подразделения ступеней отжига при низких температурах для электронно облученной меди согласуется с изложенными здесь результатами, исключая то, что промежуточные атомы не находятся в позициях, принятых Корбеттом и др. Однако настоящее исследование не настолько далеко продвинуто, чтобы позволить сопоставлять отдельные виды пар Френкеля с теми или иными ступенями отжига.

10. Колебания атомов, следующие за актом повреждения при средней энергии, по виду имеют сходство с термическими пиками, но распространение энергии является далеко не изотропным, как это можно было бы предполагать для модели термического пика в кубическом кристалле. Локализованные колебательные состояния, связанные с образованием промежуточных атомов, представляют особенно сильные возбуждения, и энергия в них задерживается больше, чем в других. Очевидно, задержка колебаний в этих областях может производить локальный отжиг.

11. По-видимому, можно считать, что проведенные вычисления доказали полную возможность интерпретировать случаи радиационного повреждения, используя математические модели в быстро решающих счетных механизмах.

Ограничение возможных размеров изучаемой атомной области является главным недостатком, и в настоящее время ищутся пути повышения размеров этой области. Также необходимы дальнейшие поиски улучшения силовых законов; работа в этом направлении также продолжается.

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. См обзоры: F. Seitz and J. S. Koeler, в сб.: Solid State Physics 2, 305 (1956); см. также Дж. Динс, Дж. Вайниард, Радиационные эффекты в твердых телах, Москва, ИЛ, 1960
2. H. Kansaki, J. Chem. Phys. Solids 2, 24 (1957); G. L. Hall, J. Chem. Phys. Solids 3, 210 (1957); A. Seeger and E. Mann, J. Chem. Phys. Solids 12, 326

(1960); L. A. Grifalco and U. G. Weizer, J. Chem. Phys. Solids 12, 260 (1960).
3. H. B. Hun-tington, Phys. Rev. 61, 1092 (1953).
4. R. A. Johnson, G. H. Goedecke, B. Brown, H. B. Huntington, Bull. Amer. Phys. Soc. 5, 181 (1960).
5. R. H. Silsbee, J. Appl. Phys. 28, 1246 (1957).
6. Proceedings of the Conf. on lattice defects in noble metals, North Am. Aviation Report HAA-SR-3250 (Office of Technical Services, Depart. of Commerce, Washington 25, D. C.).
7. G. Leibfried, J. Appl. Phys. 30, 1388 (1959).
8. G. Leibfried, J. Appl. Phys. 31, 117 (1960).
9. A. Seeger, Paper No. 998, Second International Conf. on Peaceful Uses of Atomic Energy, Geneva (1958).
10. G. H. Kinchin and R. S. Pease, Reports Progr. Phys. 18, 1 (1955).
11. J. W. Corbett, J. M. Denney, M. D. Fisk and R. M. Walker, Phys. Rev. 108, 954 (1957); T. W Corbett, R. B. Smith and R. M. Walker, Phys. Rev. 114, 1452 (1959); J. W. Corbett, R. B. Smith and R. M. Walker, Rev. 114, Phys. 1460 (1959).