

**ЗАКОН РАСПРЕДЕЛЕНИЯ В ТВЕРДОМ ТЕЛЕ
ПОГЛОЩЕННОЙ И ЗАПАСЕННОЙ ЭНЕРГИИ ИЗЛУЧЕНИЯ
ПО КРАТНОСТЯМ ЛОКАЛИЗАЦИИ**

Д. И. ВАЙСБУРД

(Представлена семинаром проблемной лаборатории электроники,
диэлектриков и полупроводников)

Свойства F -центров, образованных из радиационных вакансий¹⁾, и ряд явлений, связанных с накоплением F -центров и коагуляцией их в сложные электронные центры окраски (M -, R -, N -), хорошо укладываются в модель, согласно которой F -центры, образованные из радиационных вакансий, распределены неравномерно в объеме кристалла, и их локальная концентрация на один-два порядка превосходит среднюю. Представление о высоких локальных концентрациях F -центров, образованных из радиационных вакансий, дает возможность объяснить:

1) одинаковые свойства F -центров из радиационных вакансий и из вакансий, образованных деформацией по отношению к фотоустойчивости и коагуляции в M -центрах [1];

2) коагуляцию F -центров в M -центрах (F_2 -центры) и заметные концентрации M -центров уже при концентрациях F -центров $10^{17} \div 10^{18} \text{ см}^{-3}$, когда расстояние между F -центрами, при условии их равномерного распределения по объему, составляет $20 \div 60$ параметров решетки [2];

3) рост фото- и термоустойчивости F -центров с увеличением их концентрации [1, 5];

4) сужение линии электронного спинового резонанса F -центров при увеличении их концентрации, что может быть связано с появлением обменного взаимодействия между центрами [10, 11].

При анализе механизма, который мог бы привести к появлению высоких локальных концентраций F -центров, мы встречаем следующее противоречие.

Механизм Зейтца и его модификации [3, 4, 1], согласно которым образование вакансий под действием излучения происходит на дислокационных уступах (*jogs*), может объяснить высокие локальные концентрации F -центров, но не согласуется с огромным большинством других фактов. Поэтому механизм дислокационных уступов не может быть преобладающим и тем более единственным.

Механизм образования вакансии в идеальной решетке вследствие многократной ионизации ионов галогенов, основанный на идее Варли [5], непрерывно совершенствуется [6, 7, 8, 9] и в настоящее время согла-

¹⁾ Радиационными вакансиями мы называем вакансии, генерируемые в кристалле излучением.

соединяется с большинством экспериментальных фактов, однако не объясняет высокие локальные концентрации F -центров.

В данной работе предполагается, что возможность появления высоких локальных концентраций центров окраски, свободных радикалов и др. заложена в самом распределении в твердом теле поглощенной и запасенной энергии излучения.

Вследствие того, что энергия излучения переносится частицами и квантами, увеличение в твердом теле поглощенной и запасенной энергии излучения не есть непрерывный, а квантовый, ступенчатый процесс. С каждым поглощенным квантом или частицей поглощенная энергия увеличивается на величину энергии кванта или частицы.

Для большинства видов излучений (исключение составляют высокоэнергетические электроны, γ -кванты с энергией более $2,5 \div 10$ Мэв и космические частицы) энергия поглощенного твердым телом кванта или частицы локализуется, т. е. объем, в котором распределяется практически вся энергия поглощенного кванта или частицы, много меньше объема мишени.

Энергия тяжелых заряженных частиц (протонов, дейтронов, трионов, ядер отдачи, энергетических атомов и ионов) локализуется в объеме, непосредственно прилегающем к оси трека частицы, и запасается в виде дефектов (вакансий, смещенных атомов, центров окраски, свободных радикалов).

Предполагается, что концентрация дефектов уменьшается по гауссовому закону при удалении от оси трека. В качестве диаметра трека можно принять полуширину кривой распределения запасенной энергии.

Объем, в котором распределяется практически вся энергия одной поглощенной частицы или кванта, назовем **элементарным объемом локализации энергии**. Для тяжелых заряженных частиц элементарный объем локализации энергии можно оценить как объем цилиндра с диаметром основания, равным диаметру трека, и высотой, равной пробегу частицы в веществе.

Элементарный объем локализации энергии зависит от вида излучения и химического состава облучаемого вещества. Если облучаемое твердое тело поглотило n квантов или частиц, то существуют вероятности пространственного совпадения в облучаемом твердом теле элементарных объемов локализации энергии нескольких квантов или частиц.

Явление пространственного совпадения в твердом теле нескольких элементарных объемов локализации энергии (в более общем случае явление пространственного перекрывания элементарных объемов локализации энергии) назовем **явлением кратной локализации энергии излучения**.

А количество совпавших элементарных объемов локализации энергии назовем **кратностью локализации** r . Если поглотилось n квантов или частиц, то существуют вероятности r -кратной локализации энергии, и r может принимать значения $0, 1, 2, \dots, n$.

В облученном твердом теле в некоторой части объема энергия излучения не локализовалась, некоторая часть объема подвергалась однократной локализации энергии, некоторая часть — двукратной, некоторая часть — трехкратной и т. д.

Задача: Найти вероятностное распределение облученного объема по кратностям локализации энергии.

В качестве условий задачи выберем следующие.

Вид излучения: параллельный, однородный по интенсивности.

монохроматический пучок тяжелых заряженных частиц, в частности, протонов с энергией порядка десятка Мэв. В качестве мишени — твердое тело в форме прямого цилиндра с объемом, равным единице, а высотой, равной глубине проникновения частиц в данное вещество. Облучение параллельно оси и перпендикулярно основанию цилиндра.

Решим поставленную задачу для случая тяжелых заряженных частиц, а затем покажем ее решение для случая квантового излучения.

Для указанных выше условий нам удалось найти точное решение, которое мы приводим в форме теоремы.

Теорема о распределении в твердом теле поглощенной запасенной энергии излучения по кратностям локализации

Если при облучении твердого тела окажется, что:

- 1) элементарный объем локализации энергии равен ϑ ;
- 2) одновременно на облучаемую поверхность твердого тела, перпендикулярную пучку, падает не более одной частицы;
- 3) для каждой частицы вероятность локализации ее энергии в некоторой части образца пропорциональна объему этой части, то вероятностным разложением облученного объема твердого тела по кратностям локализации энергии есть разложение выражения вида $[(1 - \vartheta) + \vartheta]^j$ по степеням j , то есть²

$$B_{j,r} = \binom{j}{r} (1 - \vartheta)^{j-r} \vartheta^r, \quad (1)$$

где $B_{j,r}$ — вероятность r -кратной локализации; j — поглощенная доза, выраженная числом частиц.

Прежде чем приступить к доказательству, остановимся на основаниях теоремы.

Условие (1) утверждает, что теорема справедлива только для случая, когда энергия излучения локализуется, что выполняется для большинства излучений, действие которых исследовалось на твердых телах.

Условие (2) есть требование конечной интенсивности излучения и практически всегда выполняется.

Условие (3) утверждает, что частица с равной вероятностью может претерпеть столкновение в любой точке облучаемого объема, что в общем верно, если пучок параллельный, однородный по интенсивности и можно пренебречь взаимоотталкиванием частиц в пучке. Согласно условию (3) удобно выбрать объем мишени, равный единице. Тогда величины объемов и вероятностей совпадают.

Доказательство. Доказательство проведем методом полной математической индукции.

Убедимся, что указанное разложение справедливо для случая $j = 0, 1, 2, 3, 4$.

Убедившись, что теорема справедлива для $j = 0, 1, 2, 3, 4$, предположим, что теорема справедлива для $j = n$. Тогда при $j = n$ вероятность r -кратной локализации

$$B_{n,r} = \binom{n}{r} (1 - \vartheta)^{n-r} \vartheta^r,$$

²) $\binom{r}{j}$ — принятое в литературе обозначение биномиальных коэффициентов [13]:

$$\binom{r}{j} = \frac{j(j-1)\dots(j-r+1)}{r!}$$

j	Вероятности для r				
	0	1	2	3	4
0	1	0	0	0	0
1	$1-\vartheta$	ϑ	0	0	0
2	$\frac{1-\vartheta-}{-(1-\vartheta)\vartheta=}$ $=(1-\vartheta)^2;$	$\vartheta+(1-\vartheta)\vartheta-\vartheta^2=$ $=2(1-\vartheta)\vartheta;$	ϑ^2	0	0
3	$\frac{(1-\vartheta)^2-}{-(1-\vartheta)^2\vartheta=}$ $=(1-\vartheta)^3;$	$\frac{2(1-\vartheta)\vartheta+}{+(1-\vartheta)^2\vartheta-}$ $-2(1-\vartheta)\vartheta^2=$ $=3(1-\vartheta)^2\vartheta;$	$\frac{\vartheta^2+}{+2(1-\vartheta)\vartheta^2-}$ $-\vartheta^3=$ $=3(1-\vartheta)\vartheta^2;$	ϑ^3	0
4	$\frac{(1-\vartheta)^3-}{-(1-\vartheta)^3\vartheta=}$ $=(1-\vartheta)^4;$	$\frac{3(1-\vartheta)^2\vartheta+}{+(1-\vartheta)^3\vartheta-}$ $-3(1-\vartheta)^2\vartheta^2=$ $=4(1-\vartheta)^3\vartheta$	$\frac{3(1-\vartheta)\vartheta^2+}{+3(1-\vartheta)^2\vartheta^2-}$ $-3(1-\vartheta)\vartheta^3=$ $=6(1-\vartheta)^2\vartheta^2;$	$\frac{\vartheta^3+}{+3(1-\vartheta)-}$ $\vartheta^3-\vartheta^4=$ $=4(1-\vartheta)\vartheta^3;$	ϑ^4

вероятность $(r-1)$ -кратной локализации

$$B_{n,r-1} = \binom{r-1}{n} (1-\vartheta)^{n-r+1} \vartheta^{r-1}.$$

Пусть теперь $j = n+1$. Тогда вероятность r -кратной локализации при $j = n+1$:

$$B_{n+1,r} = B_{n,r} + B_{n,r-1} \cdot \vartheta - B_{n,r} \cdot \vartheta, \quad (2)$$

$$\begin{aligned} B_{n+1,r} &= \frac{n(n-1)\dots(n-r+1)}{r!} (1-\vartheta)^{n-r} \vartheta^r + \\ &+ \frac{n(n-1)\dots(n-r+2)}{(r-1)!} (1-\vartheta)^{n-r+1} \vartheta^r - \\ &- \frac{n(n-1)\dots(n-r+1)}{r!} (1-\vartheta)^{n-r} \vartheta^{r+1} = \\ &= \frac{n(n-1)\dots(n-r+1)}{r!} (1-\vartheta)^{n-r+1} \vartheta^r + \\ &+ \frac{n(n-1)\dots(n-r+2)}{(r-1)!} (1-\vartheta)^{n-r+1} \vartheta^r = \\ &= \frac{(n+1)n(n-1)\dots(n-r+2)}{r!} (1-\vartheta)^{n+1-r} \vartheta^r = \\ &= \binom{r}{n+1} (1-\vartheta)^{n+1-r} \vartheta^r, \end{aligned}$$

что и требовалось доказать.

Согласно условию (3) теоремы необходимо в случае квантового излучения учесть потерю в числе квантов при прохождении излучения через вещество.

Тогда распределение поглощенной и запасенной энергии монохроматического излучения по кратностям локализации зависит от координаты глубины мишени x и коэффициента ослабления μ и примет вид для плоскости, удаленной от облучаемой поверхности на расстоянии x ,

$$[(1 - \vartheta) + \vartheta]^{j_0} e^{-\mu x}, \quad (3)$$

где j_0 — число квантов, упавших на мишень.

Выражение (2) дает зависимость вероятности r -кратной локализации от поглощенной дозы j , выраженной числом частиц. Учитывая, что $\vartheta \ll 1$, $j \gg 1$ (например, для циклотрона ТПИ $j \approx 10^{10} \div 10^{16}$ протонов), для случаев $r \ll j$ выражение (2) можно упростить:

$$B_{j,r} = \binom{r}{j} (1 - \vartheta)^{j-r} \vartheta^r = \frac{(j\vartheta)^r}{r!} (1 - \vartheta)^{j-r} \approx \frac{(j\vartheta)^r}{r!} e^{-j\vartheta}.$$

Итак,

$$B_{j,r} = \frac{(j\vartheta)^r}{r!} e^{-j\vartheta} \text{ при } j \gg r. \quad (4)$$

Вычисленные согласно (4) вероятности r -кратной локализации энергии сведены в табл. 1. На рис. 1 и 2 построены по данным табл. 1

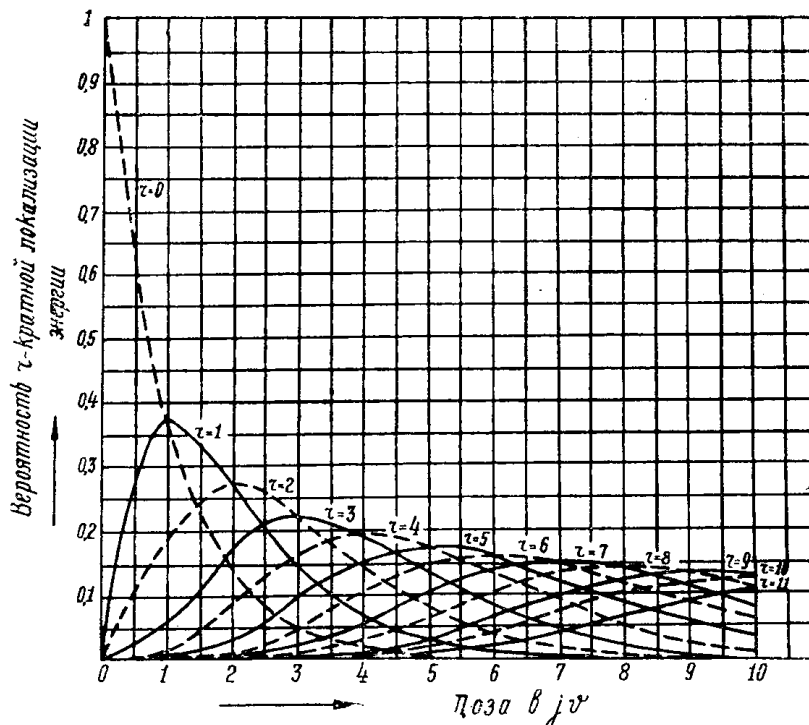


Рис. 1. Зависимость вероятности r -кратной локализации энергии от дозы в $(j\vartheta)$.

зависимости вероятностей r -кратной локализации (для $r = 0 \div 21$) от дозы (для $j\vartheta = 0 \div 10$) и распределение облученного объема по кратностям локализации энергии для доз $j\vartheta = 1 \div 10$.

Как видно из рис. 1, $B_{j,r} = f(j\vartheta)$ изображается кривой с максимумом.

Следствие 1. Максимум вероятности r -кратной локализации наступает для дозы $j\vartheta = r$.

Действительно,

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial (j\vartheta)} B_{j,r} &= \frac{r (j\vartheta)^{r-1}}{r!} e^{-j\vartheta} - \frac{(j\vartheta)^r}{r!} e^{-j\vartheta} = \\ &= \frac{(j\vartheta)^{r-1}}{r!} e^{-j\vartheta} (r - j\vartheta) = 0; \end{aligned} \quad (5)$$

$$j\vartheta = r. \quad (6)$$

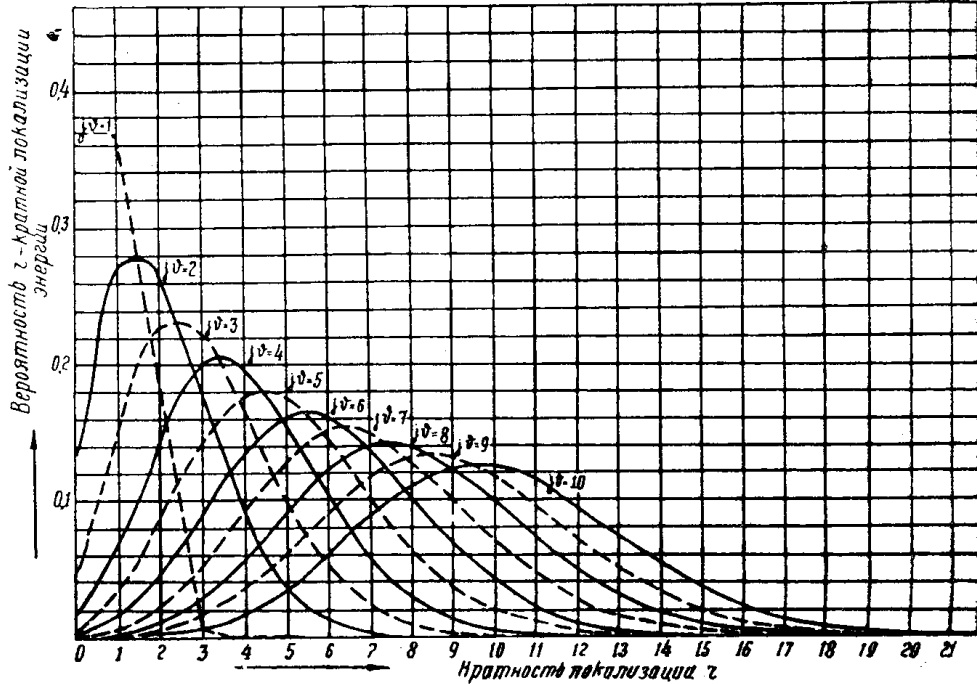


Рис. 2. Вероятностное распределение облученного объема по кратностям локализации энергии для различных доз ($j\vartheta$).

Следствие 2. Вероятность r -кратной локализации имеет максимальную скорость изменения при $j\vartheta = r \pm \sqrt{r}$:

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2}{\partial (j\vartheta)^2} B_{j,r} &= \frac{(r-1)(j\vartheta)^{r-2}}{(r-1)!} e^{-j\vartheta} - \frac{(j\vartheta)^{r-1}}{(r-1)!} e^{-j\vartheta} - \\ &- \frac{r (j\vartheta)^{r-1}}{r!} e^{-j\vartheta} + \frac{(j\vartheta)^r}{r!} e^{-j\vartheta} = \frac{(j\vartheta)^{r-2}}{r!} e^{-j\vartheta} [r^2 - r - 2rj\vartheta + (j\vartheta)^2] = 0; \end{aligned}$$

$$r^2 - r - 2rj\vartheta + (j\vartheta)^2 = 0;$$

$$j\vartheta = r \pm \sqrt{r}. \quad (7)$$

Следствие 3. Если B_r — максимальная вероятность r -кратной локализации, а B_{r+1} — максимальная вероятность $(r+1)$ -кратной локализации, то

$$\frac{B_r}{B_{r+1}} = \left(\frac{r}{r+1} \right)^r \cdot e.$$

Согласно следствию 1

$$B_r = \frac{r^r}{r!} e^{-r} = \frac{r^{r-1}}{(r-1)!} \cdot e^{-r}, \quad (8)$$

$$\frac{B_r}{B_{r+1}} = \left(\frac{r}{r+1}\right)^r \cdot e. \quad (9)$$

Как видно из рис. 2, зависимость

$$B_{j,r} = f(r) \text{ при } j\vartheta = \text{const}$$

изображается кривой с максимумом, причем с увеличением дозы максимум распределения смещается с постоянной скоростью в сторону больших кратностей, а высота максимума уменьшается по закону (9).

Полученные закономерности позволяют объяснить неравномерное распределение радиационных дефектов и предсказать, как неравномерность распределения изменяется с увеличением дозы для кристаллов разного химического состава при облучении их разными видами излучений. Применение выведенных в данной работе соотношений к анализу экспериментальных данных иллюстрируется в работе [12].

Благодарю профессора доктора физико-математических наук А. А. Воробьева и доцента И. Я. Мелик-Гайказян за обсуждение полученных результатов.

ЛИТЕРАТУРА

1. P. V. Mitchell, D. A. Wiegand and R. Smoluchowski. Phys. Rev. 121, № 2, 484 (1961).
2. B. J. Faraday, H. Rabin and W. D. Compton. Phys. Rev. Letters 7, № 2, 57 (1961).
3. F. Seitz. Revs Mod. Phys 18, 384 (1946); Phys. Rev. 80, 239 (1950).
4. J. J. Markham. Phys. Rev. 88, 500 (1952).
5. J. H. O. Varley. Nature 174, 886 (1954), J. Nuclear Energy 1, 130 (1954).
6. C. C. Klick. Phys. Rev. 120, 760 (1960).
7. R. E. Howard, S. Vosko and R. Smoluchowski. Phys. Rev. 122, 1406 (1961).
8. F. E. Williams. Phys. Rev. 126, 70 (1962).
9. J. Sharma and R. Smoluchowski. Bull. Am. Phys. Soc. 7, 178 (1962).
10. A. M. Portis. Phys. Rev. 91, 1071 (1953).
11. N. W. Lord. Phys. Rev. 105, 756 (1957).
12. Д. И. Вайсбурд, И. Я. Мелик-Гайказян. См. настоящий сборник, стр. 3.
13. Дж. Риордан. Введение в комбинаторный анализ, ИЛ, 1963.