

УДК 539.12.04

A. И. КУПЧИШИН, А. К. ТОГАМБАЕВА, Т. А. ШМЫГАЛЕВА

СВЯЗЬ СПЕКТРОВ ПЕРВИЧНО-ВЫБИТЫХ АТОМОВ И КОНЦЕНТРАЦИИ РАДИАЦИОННЫХ ДЕФЕКТОВ С МАРКОВСКИМИ ПРОЦЕССАМИ

Изучена взаимосвязь спектров первично-выбитых атомов и концентрации радиационных дефектов для электронов, протонов, альфа-частиц, ионов с цепями Маркова и Марковскими процессами.

При электронном облучении зависимость концентрации радиационных дефектов от глубины и энергии электронов представляется в виде [1]:

$$C_d^{cm}(E, h) = \int_{E_d}^{E_{2\max}} \nu(E_2) W(E_0, E_2, h) dE_2, \quad (1)$$

где $W(E_0, E_2, h)$ – спектр первично-выбитых атомов (ПВА); E_0 – энергия электрона.

Представим формулу (1) в следующем виде:

$$C_d^{cm}(E, h) = \int_{E_d}^{E_{2\max}} \nu_0 \gamma(E_2) \varphi_0 \cdot \varphi(E_0, E_1, h) dE_2, \quad (2)$$

где $\nu(E_2) = \nu_0 \gamma(E_2)$, $W(E_0, E_1, h) = \varphi_0 \varphi(E_0, E_1, h)$, ν_0, φ_0 – нормировочные коэффициенты.

Тогда

$$\begin{aligned} \int_{E_d}^{E_{2\max}} \gamma(E_2) dE_2 &= 1, \\ \int_{E_d}^{E_{2\max}} \varphi(E_0, E_1, h) dE_2 &= 1. \end{aligned}$$

Перепишем (2) в следующем виде:

$$C_d^{cm}(E, h) = \varphi_0 \nu_0 \int_{E_d}^{E_{2\max}} \varphi(E_0, E_1, h) \gamma(E_2) dE_2. \quad (3)$$

В данном выражении под знаком интеграла имеем произведение вероятностей: $\varphi(E_0, E_1, h)$ – вероятность того, что на глубине h образуется 1 ПВА от одного электрона с энергией E_0 и $\gamma(E_2)$ – условная вероятность того, что ПВА выбьет один

вторично-выбитый атом с энергией E_2 . В левой части выражения имеем C_d – вероятность того, что от 1-го электрона образуется определенное количество дефектов. Нормировочный коэффициент φ_0 есть число ПВА от одного электрона с энергией E_0 , ν_0 – число вторично-выбитых атомов от 1-го ПВА с энергией E_2 .

Выражение (3) получается из уравнения Колмогорова-Чэпмена [2]:

$$\Psi_{ij} = \sum_k \Psi_{ik} \Psi_{kj},$$

где $\Psi_{ik} = \varphi(E_0, E_i, h)$, $\Psi_{kj} = \gamma(E_j)$.

Поскольку образование радиационных дефектов может происходить при любой энергии E_2 , знак суммы в этой формуле заменен интегралом.

Спектр первично-выбитых атомов, входящий в выражение (1), записывается в следующем виде:

$$\begin{aligned} W(E_0, E_2, h) &= \sum_{i=0}^h \int_0^h \left(\frac{h'}{\lambda_1} \right)^i \frac{1}{i!} \exp \left(-\frac{h'}{\lambda_1} - \frac{h-h'}{\lambda_2} \right) \times \\ &\times \frac{\omega(E_0, E_2, h')}{\lambda_2} \frac{dh'}{\lambda_1}, \end{aligned} \quad (4)$$

В этом выражении под знаком интеграла содержится произведение вероятностей. Перечислим их:

$$1. \left(\frac{h'}{\lambda_1} \right)^i \frac{1}{i!} \exp \left(-\frac{h'}{\lambda_1} \right) = \psi_{ik}, \quad (5)$$

ψ_{ik} – вероятность того, что электрон достигнет глубины h' после $(n-1)$ -го соударения при условии,

что произошло предыдущее событие, а именно, на некоторой глубине была генерирована первичная частица – электрон.

2. $\omega(E_0, E_2, h) = \psi_{km}$ – условная вероятность того, что образовался первично-выбитый атом с энергией E_2 от электрона с энергией E_0 после n -кратного соударения.

3. $\exp\left(-\frac{h-h'}{\lambda_2}\right)/\lambda_2 = \psi_{ms}$ – условная вероятность того, что ПВА, образованный на глубине h' в n -кратном взаимодействии электрона с веществом, достигнет глубины h .

Спектр ПВА $W(E_0, E_2, h)$ есть вероятность того, что от 1-го электрона с энергией E_0 образуется определенное количество вторичных частиц с энергией E_2 на глубине h .

В общем случае – (все функции) $\psi_{ik}, \psi_{km}, \psi_{ms}$ представляют собой вероятности перехода для цепи Маркова соответственно из i -го состояния в k -е; из k -го в m -е; из m -го в s -е.

Уравнение Колмогорова-Чэпмена записывается в следующем виде:

$$\psi_{ij} = \sum_k \sum_m \Psi_{ik} \cdot \Psi_{km} \cdot \Psi_{ms}, \quad (6)$$

$\psi_{ij} = W$ – вероятность перехода из i -го состояния в j -е.

Поскольку состояния системы непрерывны по глубине, то выражение (6) преобразуется в следующее:

$$W(E_0, E_2, h) = \psi_{ij} = \sum_{n=0}^{n_1} \int_0^h \psi_{ik} \cdot \psi_{km} \cdot \psi_{ms}. \quad (7)$$

При использовании КВФ с учетом потерь энергии вместо простейшей КВФ (5) для расчета спектра ПВА, под знаком интеграла имеем также произведение вероятностей: $\psi_{ik}, \psi_{km}, \psi_{ms}$, где ψ_{ik} имеет уже другой вид:

$$\psi_{ik} = \frac{1}{\lambda_0^n} \left(\frac{E_0}{E_0 - kh'} \right)^{\frac{1}{\lambda_0 ak}} \exp\left(-\frac{h'}{\lambda_0}\right) \times$$

$$\times \left(h' - \frac{\ln\left(\frac{E_0}{E_0 - kh'}\right)}{ak} \right)^n,$$

а вероятности ψ_{km}, ψ_{ms} имеют тот же смысл, что и в формуле (4), а $W(E_0, E_2, h) = \psi_{ij}$ описывается, как и в случае использования простейшей КВФ формулой (6), которая преобразуется в (7).

Таким образом, процесс образования радиационных дефектов в твердых телах при электронном облучении описывается цепью Маркова.

Процесс взаимодействия протонов, альфа-частиц и ионов с твердым телом и образования первично-выбитых атомов также описывается цепью Маркова, вероятности переходов имеют тот же смысл, что и для электронов, только налетающей частицей является протон, альфа-частица или ион.

Заключение. Таким образом, процессы прохождения частиц через вещество и образование в нем радиационных дефектов можно рассматривать как Марковские процессы, непрерывные по времени и дискретные по числу соударений. Конечные выражения для ψ, N и C представляются нами в виде сумм, интегралов и произведений соответствующих условных вероятностей и нормировочных коэффициентов, зависящих от типов и энергии частиц, каналов реакций, дифференциальных и интегральных сечений взаимодействия, потерь энергии, параметров элементарного акта, плотности среды и т.д.

В работе показано, что каскадно-вероятностный метод связан с уравнениями Колмогорова-Чэпмена, а все процессы, описываемые в рамках этого метода, являются Марковскими.

ЛИТЕРАТУРА

1. Купчишин А.А., Купчишин А.И., Шмыгалева Т.А. Компьютерное моделирование радиационно-физических задач. Монография. Алматы: Казак университеті, 2007. 432 с.

2. Колмогоров А.Н. Основные понятия теории вероятностей. М.: Наука, 1974. 119 с.

Резюме

Алғашқы соғылған атомдар спектрлерімен электрондар, протондар, альфа-бөлшектер, иондар радиациялық ақаулар концентрациясының Марков тізбектерімен және Марков процестерімен карым-катастынастары зерттелген.

Summary

In the work of the intercorrelation of primarily knocked-out atoms spectraprocesses and radiation defects formation with Markov chains and Markov processes is studied.

Поступила 10.02.09г.