

среднее по глубине значение составляет 10 ат. %.

Особенностью распределения азота в поверхностном слое системы Zr/твердый сплав является увеличение средней концентрации азота в сравнении с твердым сплавом без покрытия, а также с ростом количества импульсов до 25 ат. % при плотности энергии воздействия КПП 34 Дж/см² и давлении азота 10 Торр.

Список литературы

- 1 Кулешов А.К., Крутилина Е.А., Кузьмицкий А.М., Комста Х., Данилович Ю.А. // Материалы X Международной конференции «Взаимодействие излучений с твердым телом» 24-27 сентября 2013 г., Минск, с. 309-312.
- 2 Uglov V.V., Anishchik V.M., Astashinski V.M., Cherenda N.N., Gimro L.G., Kovyaza A.V. // Surface and Coatings Technology. 2005. V. 200. P. 245-249.
- 3 Koval N.N., Ivanov Yu.F., Ovcharenko V.E., Kolubaeva Yu.A., Grigoryev S.V., Teresov A.D. // IEEE transactions on Plasma Science. 2009. V. 37. № 10. P. 1998-2001.
- 4 Uglov V.V., Remnev G.E., Kuleshov A.K., Astashinski V.M., Saltymakov M.S. // Surf. and Coat. Technol. 2010, V. 206. P. 781-784.
- 5 Асташинский, В.М. Г.И. Баканович, Л.Я. Минько // Физика плазмы. 1984. Т. 10. № 5. С. 1058-1063.
- 6 Holloway P.H. // Surf. Sci. 1977. V. 66. P. 479-494.
- 7 Углов В. В., Кулешов А. К., Крутилина Е. А., Асташинский В. М., Кузьмицкий А. М. // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. 2013. № 4. С. 81-88.
- 8 Cherenda N.N., Shymanski V.I., Uglov V.V., Astashynski V.M., Ukhov V.A. // Journal of Surface Investigation: X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques. 2012. V. 6. P. 319-325.

THE NITROGEN ACCUMULATION IN MELTED SURFACE LAYERS OF HARD ALLOY TREATED BY COMPRESSION PLASMA FLOWS

A.K. Kuleschov¹, N.N. Cherenda¹, E.A. Krutisilina¹, V.M. Astashinski², V.M. Anischik¹, M. Opielak³, C. Karwat³

¹Belarusian State University

4 Nezavisimosti av., Minsk, 220030, Belarus, uglov@bsu.by

²A.V. Luikov heat and mass transfer Institute of Belarus National Academy of Sciences,

15 P. Brovkiy str., Minsk, 220072, Belarus, ast@hmti.ac.by

³Lublin University of Technology, Lublin, Poland

In this work the nitrogen accumulation in surface layer of hard alloy and Zr/hard alloy system after CPF treatment was investigated. The treated parameters were following: energy density of 34 and 41 J/cm² in nitrogen atmosphere 3 and 10 Torr. It was found that the nitrogen accumulation in hard alloy takes place in about 0,2 μm surface layer and the greatest revealed mean nitrogen concentration in this layer was about 10 at.%. The greatest mean nitrogen concentration in 0.2 μm layer for treated Zr/hard alloy system was about 25 at.% and was obtained for 30 Torr nitrogen pressure in camera.

КАСКАДНО-ВЕРОЯТНОСТНЫЙ МЕТОД МОДЕЛИРОВАНИЯ ПРОХОЖДЕНИЯ ЧАСТИЦ ЧЕРЕЗ ВЕЩЕСТВО. СВЯЗЬ С ЦЕПЯМИ МАРКОВА, УРАВНЕНИЯМИ ТИПА БОЛЬЦМАНА

А.И. Купчишин^{1, 2)}

¹⁾Казахский национальный университет им. аль-Фараби,
пр. аль-Фараби, 71, Алматы, 050040, Казахстан

²⁾Казахский национальный педагогический университет им. Абая,
Алматы, Казахстан, ankupchishin@mail.ru

Предложен новый (каскадно-вероятностный) метод (КВМ) моделирования прохождения частиц через вещество. Установлена его связь с уравнениями Колмогорова-Чэпмена, Больцмана, цепями Маркова, распределениями Пуассона, Максвелла, Пойа, гипергеометрического отрицательного биномиального распределения и др. В рамках КВМ приведено общее решение уравнения каскадного процесса.

Введение

В связи с интенсивным развитием ядерной энергетики, исследованиями различных физических процессов в околоземном космическом пространстве, в частности, в радиационных поясах Земли, изучение влияния электронного, гамма, нуклонного и ядерного облучения на свойства материалов в последние годы стало одним из самых актуальных направлений в физике твердого тела и вылилось в самостоятельное направление - "Радиационную

физику твердого тела". В результате бомбардировки твердых тел заряженными частицами, например, электронами, протонами и ядрами, по пути их движения генерируются не только легкие вторичные частицы типа электронов (когда энергия теряется в основном на ионизацию атомов), но и тяжелые атомы и ионы среды, являющиеся родоначальниками атом-атомных каскадов. Нейтроны, взаимодействуя с веществом, также образуют первично-выбитые атомы (ПВА). Однако ввиду их

огромной проникающей способности, они, в отличие от заряженных частиц, создают радиационные повреждения и на значительно больших расстояниях. Энергетический спектр ПВА на различных глубинах в материале зависит от энергии, массы налетающих частиц и типа мишени (массы атомов, плотности), интегральных и дифференциальных сечений частица-атом и атом-атомных соударений, а также потерь энергии на ионизацию и возбуждение. Распространяясь в среде, первично-выбитые атомы генерируют вторично-выбитые атомы, затем третичные и т.п. В конечном счете в твердом теле после первой стадии процесса образуются радиационные дефекты типа вакансии-межузельный атом, дивакансия и два выбитых атома и так далее. В результате развития диффузионных процессов дефекты, взаимодействуя между собой, превращаются в вакансионные комплексы, скопления межузельных атомов. Типы дефектов, их распределение по размерам и глубинам облученного образца зависят не только от типа, энергии частиц, вида материала, но и концентрации примесей, дозы, температуры, равномерности и времени облучения и являются ответственными за изменение всех свойств облученного материала [1–3].

Следует заметить, что в большом числе задач радиационной физики и радиационного материаловедения рассматриваются процессы, в которых дефекты распределяются относительно равномерно по объему облучаемого материала, и актуальной является задача определения суммарного числа дефектов, внесенных облучением в материалы. Однако по мере развития радиационных исследований и расширением круга их приложений все актуальней становится противоположная ситуация, когда дефекты распределены существенно неоднородно по глубине материала. Примером такого рода распределений являются ионы внедрения, приводящие к упрочнению приповерхностных слоев металлов. Неоднородное распределение радиационных дефектов по глубине сильно отражается на условиях их отжига, потому что поверхность может служить эффективным стоком для вакансий и межузельных атомов; в то же время возможна диффузия дефектов из области, обогащенной ими, в объем образца.

Следует заметить, что для понимания и описания указанных явлений, с одной стороны, нужно знать, что происходит с частицами (как первичными, так и вторичными, генерированными в различного рода соударениях). При описании указанных процессов возникает проблема выбора теоретического метода исследования. В настоящее время наиболее известными и широко применяемыми теоретическими методами расчета являются метод Монте-Карло, кинетические уравнения Больцмана, уравнение Фокера-Планка и различные специализированные методы и модели. Нисколько не умаляя широко известных численных методов и моделей, по-видимому,

можно считать, что несомненным преимуществом по сравнению с ними обладают аналитические методы, даже если с их помощью удастся лишь приближенно описать какое-то явление. В данной работе приведена общая теория (с приложениями) каскадно-вероятностного метода для решения задач, связанных с прохождением частиц через вещество. Установлена ее связь с цепями Маркова, уравнениями Колмогорова-Чэпмена и уравнениями каскадного процесса типа Больцмана.

Каскадно-вероятностный метод и его приложения

История каскадно-вероятностного (КВ) метода берет свое начало с 1964 года с наших работ, связанных с расчетами интегральной кратности и коэффициентов связи мю-мезонной компоненты космических лучей и вывода аналитического выражения для вероятности пи-мезону, генерированному на глубине h' достичь глубины h после j -го числа взаимодействий. Впоследствии эта вероятность была названа каскадно-вероятностной функцией (КВ-функцией, КВФ) для пи-мезонов и т. д. На данный момент выведено большое количество формул для КВФ, практически для всех элементарных частиц, проведен их глубокий математический анализ с доказательством в каждом случае физического смысла. Опубликовано 8 монографий и более ста статей в различных международных и республиканских изданиях. Несмотря на сложные выражения для потоков частиц и других функций, составлены уникальные алгоритмы (с использованием теоретико-числового метода Коробова – метода оптимальных коэффициентов), соответствующие программы и рассчитаны необходимые функции на ЭВМ. Более чем в двадцати исследуемых процессах расчеты совпадают с известными экспериментальными зависимостями, в том числе и нашими. Выбрать необходимые параметры и функции помогли нам многократные обсуждения с ведущими учеными объединенного института ядерных исследований (г. Дубна Московской области, Россия) [1]. Совместно с Э.Г. Боосом получены простейшие и обобщенные каскадно-вероятностные функции для стабильных и нестабильных частиц и античастиц, которые связаны с простейшими распределениями (Максвелла, Пуассона, гипергеометрического отрицательного биномиального распределения и др.), сделан их математический анализ и проанализированы все свойства в рамках теории вероятностей. Получен ряд рекуррентных соотношений. Вместе с Ф. Айтбаевым нам удалось решить несколько простейших уравнений типа Больцмана. На удивление, во все решения входят каскадно-вероятностные функции, которые были получены нами ранее в рамках теории вероятностей и каскадно-вероятностного метода. Обобщенная КВФ после раскрытия неопределенности функции n -переменных (при равенстве углов вылета частиц и пробегов взаимодействия), превращается сначала в простейшую КВ-функцию, а затем – в

распределение Пуассона. Именно в это время метод был назван каскадно-вероятностным, а вероятностные функции – каскадно-вероятностными функциями. Получено довольно большое количество аналитических и графических зависимостей различных физических процессов, в том числе интегральных кратностей, коэффициентов связи, потоков частиц, интенсивности различных компонент космического излучения на разных глубинах в атмосфере Земли. Значительная часть работ связана с применением метода в радиационной и позитронной физике [4–7]. Все наши формулы мы связали с цепями Маркова и уравнениями Колмогорова-Чэпмена. Создалась целостная картина каскадно-вероятностного метода.

Основные результаты

Основные результаты, полученные нами за пятидесятилетний срок работы следующие. Выведены аналитические выражения: а) КВФ для стабильных частиц (простейшая КВ-функция, найденная при постоянстве пробега взаимодействия и угла вылета частицы в элементарном акте после соударения; обобщенная каскадно-вероятностная функция, выведенная для любых изменений пробега и угла); б) КВФ для нестабильных частиц (пи-мезоны и др., мю-мезоны, нейтроны, позитроны и т.д.); в) КВФ для протонов, альфа-частиц, ионов с учетом потерь энергии; установлены свойства этих вероятностей (до двадцати), предельные переходы, подтверждающие физический смысл каждого изучаемого процесса; г) составлены алгоритмы и произведены расчеты полученных функций на ЭВМ; д) установлена связь КВФ с простейшими уравнениями каскадного процесса (типа Больцмана) и цепями Маркова; е) рассчитаны интегральные кратности и коэффициенты связи мю-мезонной компоненты космических лучей на различных глубинах в атмосфере; ж) рассчитаны интегральные кратности и коэффициенты связи нейтронной компоненты космических лучей на различных глубинах в атмосфере; з) рассчитаны потоки пионной компоненты космических лучей на различных глубинах в атмосфере; и) рассчитан широтный ход интенсивностей мю-мезонной и нейтронной компонентов космических лучей; к) рассчитаны пространственные распределения радиационных дефектов в различных материалах, облученных электронами высоких энергий, рассчитаны пространственные распределения радиационных дефектов по данным метода позитронного глубинного зондирования в различных материалах, облученных протонами, согласующиеся с экспериментом (по данным электросопротивления, внутреннего трения, электронной микроскопии, позитронной аннигиляции и т.д.); На основе анализа всех результатов и после перехода от функции распределения к потоку частиц в сферической системе координат, общее решение для системы нестационарных уравнений типа Больцмана для m -й компоненты частиц (с учетом генерации и выбывания частиц из фазового объема) в рамках каскадно-вероятностного метода может быть записано в виде [7]:

$$N_m(x, y, z, \theta, \varphi, E, t) = \sum_{ink} \dots \sum_{\dots} \int_{V_i, \Omega, E_i} N_{0e}(t=0, x', y', z', \theta', \varphi', E') \frac{1}{\lambda_0 \cos \theta_0} \cdot$$

$$\cdot \chi_0(x', y', z', \theta', \varphi', E', t') \frac{d\sigma}{\sigma_0 d\Omega dE_0} dV_0 J_0 \dots \cdot$$

$$\cdot \frac{1}{\lambda_n \cos \theta_n} \chi_{0in}(x^n, y^n, z^n, \theta^n, \varphi^n, E^n, t^n) \frac{d\sigma}{\sigma_n d\Omega dE_n} dV_n J_n, \quad (1)$$

где $N_m(x, y, z, \theta, \varphi, E, t)$ – интенсивность m -х частиц на глубине x, y, z , под зенитным θ и азимутальным φ углом, с энергией E , в момент времени t ; χ_i – вероятность пройти путь Γ_i под углами θ_i, φ_i с энергией E_i без взаимодействия; $\frac{d\sigma}{d\Omega dE_i}$ – дифференциальное сечение взаимодействия; $dV_n(x_n, y_n, z_n)$ – элемент объема; J_n – якобиан перехода; i, n, k – число поколений взаимодействий и каналов реакций.

Пятидесятилетний опыт работы позволил нам разобраться в большом количестве деталей как в общей теории каскадно-вероятностного метода, так и при решении оригинальных задач в области физики космических лучей, позитронной и радиационной физики твердого тела. Приведем некоторые общие особенности расчета функций распределения многих физических процессов и при решении уравнений каскадного процесса (типа Больцмана), которые в значительной мере помогут решить конкретные задачи.

1. Используя общее решение, довольно просто получить конкретную формулу для расчета. Для этого необходимо, прежде всего, глубоко разобраться в физике процесса, составить физическую и математическую модель, выделить из бесконечного числа сумм только те, которые дают основной вклад в исследуемую функцию. Лучше всего это сделать, используя опыт решения наших, уже решенных, задач.

2. Найти области определения всех параметров полученного выражения для потока частиц. При интегрировании и вычислении интегралов на компьютере провести глубокий математический анализ, найти реальную область интегрирования, составить правильный алгоритм, программу и произвести необходимые вычисления на ЭВМ. При этом в процессе расчетов нужно постоянно вмешиваться в структуру вычислительных работ на компьютере и стараться установить различные закономерности и понять физический смысл происходящих процессов. Иначе расчеты будут сильно завышенными или заниженными из-за ошибочного алгоритма.

3. Нельзя забывать, что в большинстве случаев (для двухмерной или трехмерной моделей элементарного акта и др.) необходимо рассчитывать якобианы перехода. При этом нужно использовать формулы из сферической астрономии или тригонометрии (формулы для связи углов, в частности для выбранных параметров в системе центра масс и в лабораторной системе координат).

4. При выборе нормированных дифференциальных энергетических спектров частиц в элементарном акте на основе сечений взаимодействия нужно, прежде всего, проверить их примени-

мость для данного случая, поскольку, например, для релятивистского и нерелятивистского случаев они могут сильно различаться.

5. В пределах интегрирования или при начальных значениях исходных данных, а также при некоторых значениях параметров исследуемая функция может давать деление на ноль (и др.) с образованием неопределенности типа ноль, деленное на ноль; бесконечность, деленная на бесконечность; бесконечность минус бесконечность и т.д. Раскрыть неопределенность можно либо по правилу Лопиталя, либо нужно получить другую формулу, в которой эта неопределенность отсутствует (как правило, при этом происходит уменьшение количества интегралов на единицу и более). Можно также уменьшить для начала пределы интегрирования и не брать интегралы в этих точках, а затем откорректировать процедуру. Как нам кажется, это может сильно повлиять на конечный результат. Кроме этого, данные нужно постоянно анализировать и корректировать.

6. Нередко основной вклад в результат дают первые члены сумм. Нужно построить график зависимости рассчитываемой функции от параметров суммирования (число взаимодействий и поколений, каналов реакций и т.д.) и установить значения этих параметров, при которых дальнейшими членами суммы можно пренебречь. Список рекомендаций можно было бы продолжить.

Заключение

В заключение следует заметить, что использование каскадно-вероятностного метода является довольно непростой задачей, не всегда и не сразу можно найти правильные решения постав-

ленных задач. Все зависит от конкретного физического процесса и разработанной математической модели. В данной работе приведена общая теория каскадно-вероятностного метода для решения задач, связанных с прохождением частиц через вещество. Установлена его связь с цепями Маркова, уравнениями Колмогорова-Чэпмена и уравнениями каскадного процесса типа Больцмана. Приведены конкретные задачи, решенные в рамках КВМ, удовлетворительно согласующиеся с экспериментальными данными.

Список литературы

1. Мурзин В.С., Сарычева Л.И. Космические лучи и их взаимодействие. М.: Атомиздат, 1968. 392 с.
2. Брэструп К.Б., Уикофф Г.О. Руководство по радиационной защите. М.: Госмедиздат, 1962. 332 с.
3. Burenkov A.F., Komarov F.F., Kumakhov M.A., Temkin M.M. Tables of ion implantation spatial distributions. New York-London-Paris: Gordon and Breach, 1986. 462 p.
4. Боос Э.Г., Купчишин А.И. Решение физических задач каскадно-вероятностным методом. Алма-Ата: Наука, 1988. Ч.1. 112 с., Ч.2. 144 с.
5. Купчишин А.А., Купчишин А.И., Шмыгалева Т.А. Компьютерное моделирование радиационно-физических задач. Алматы: Қазақ университеті, 2007. 432 с.
6. Купчишин А.И., Лисицын В. М., Купчишин А.А. Взаимодействие высокоэнергетического излучения с веществом. Томск: Изд-во Томского политехнического университета, 2014. 153 с.
7. Боос Э.Г., Купчишин А.И., Купчишин А.А., Шмыгалева Е.В., Шмыгалева Т.А. Каскадно-вероятностный метод. Решение радиационно-физических задач, уравнений Больцмана. Связь с цепями Маркова. Алматы, КазНПУ им. Абая, НИИ НХТ и М КазНУ им. аль-Фараби, ТОО «КАМА», 2015. 388 с.

THE CASCADE-PROBABILISTIC METHOD OF PARTICLES-THROUGH-MATERIALS PROPAGATION MODELLING. CONNECTION WITH THE MARKOV'S CHAINS, BOLTZMANN EQUATIONS

A.I. Kupchishin^{1, 2)}

¹⁾Al-Farabi Kazakh National University, 71 al-Farabi Ave., Almaty, 050040, Kazakhstan

²⁾Kazakh National Pedagogical University Abai, Almaty,, Kazakhstan, ankupchishin@mail.ru

The work was performed within in the context of cascade-probabilistic method, the essence of which is to obtain and further application of cascade-probability functions (CPF) for different particles. CPF make sense probability of that a particle generated at some depth h' reaches a certain depth h after the n -th number of collisions. We consider the interaction of particle with solids and relationship between radiation defect formation processes and Markov processes and Markov chains. It shows how to get the recurrence relations for the simplest CPF from the Chapman-Kolmogorov equations.