

МЕТОД УЧЕТА РЕКОМБИНАЦИИ ТОЧЕЧНЫХ ДЕФЕКТОВ В ТЕОРИИ ДИФФУЗИОННЫХ ПРОЦЕССОВ В КРИСТАЛЛАХ ПОД ОБЛУЧЕНИЕМ

В.В. Слезов¹, П.Н. Остапчук²

¹Национальный научный центр «Харьковский физико-технический институт»,
Харьков, Украина;

²Институт электрофизики и радиационных технологий НАН Украины,
Харьков, Украина

E-mail: ostapchuk@kipt.kharkov.ua

Предложен способ приближенного учета квадратичного слагаемого рекомбинационного типа в диффузионной задаче в области влияния стока. Суть его состоит в следующем: вблизи границы стока этим слагаемым, как и ранее, пренебрегаем в силу малости концентрации точечных дефектов; вблизи границы области влияния нелинейную часть диффузионного уравнения приближенно линеаризуем из-за малости градиента концентрации. В качестве точки шивки концентрации и потока предлагается выбрать точку перегиба квадрата концентрации. Сравнение точных и приближенных решений приведено для линейной и сферически симметричной задач.

PACS: 66.30.LW

Как известно, облучение кристалла приводит, прежде всего, к смещению атомов из узлов кристаллической решетки, образуя при этом пары точечных дефектов (ТД) – вакансий и собственных межузельных атомов (СМА). Их дальнейшая судьба – уход на стоки или объемная рекомбинация. Центральной задачей теории является вычисление потоков ТД на каждый тип стока (пору, дислокацию, межзеренную границу и т.д.). При этом вводятся понятия области влияния данного стока и эффективной поглощающей среды, моделирующей наличие других стоков [1-3]. По определению, в области влияния нет иных стоков, кроме выделенного, и ТД, рождаемые в ней облучением, поглощаются только содержащимися в ней же стоком либо рекомбинируют. ТД, рождаемые вне области влияния данного стока, поглощаются другими стоками или опять же рекомбинируют. Искомые потоки вычисляются в стандартном приближении развитой структуры стоков, когда длина диффузионного пробега ТД относительно рекомбинации много больше среднего расстояния между стоками. Тогда рекомбинация учитывается только в общем балансе ТД, а в области влияния стока ею пренебрегают.

В данном сообщении предлагается способ приближенного учета рекомбинационного слагаемого в диффузионной задаче в области влияния стока. Основную физическую идею можно изложить на простой, точно решаемой, модельной задаче:

$$D \frac{d^2 C}{dx^2} + K - \beta C^2 = 0; \quad C|_{x=L} = 0; \\ \frac{dC}{dx}|_{x=L_0} = 0, \quad (1)$$

где $C(x)$ - концентрация ТД; D - коэффициент диффузии; K - интенсивность источника ТД, смещ./(ат.·с); β - скорость их взаимной

рекомбинации. Введем безразмерные $\tilde{x} = x/l$ и $\tilde{C} = C/C_0$, где $C_0 = \sqrt{K/\beta}$, а $l^2 = D/\sqrt{K\beta}$. Тогда (1) переписывается в виде:

$$\frac{d^2 \tilde{C}}{d\tilde{x}^2} + 1 - \tilde{C}^2 = 0; \quad \tilde{C}|_{\tilde{x}=R} = 0; \\ \frac{d\tilde{C}}{d\tilde{x}}|_{\tilde{x}=R_0} = 0; \quad R = L/l; \quad R_0 = L_0/l. \quad (2)$$

Умножая (2) на $d\tilde{C}/d\tilde{x}$ и интегрируя с учетом граничных условий, получаем решение в неявном виде:

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \int_0^{\tilde{C}} \frac{dc}{\left[(\tilde{C}^* - c) \left(1 - \frac{\tilde{C}^{*2} + \tilde{C}^*c + c^2}{3} \right) \right]^{1/2}} = \tilde{x} - R; \\ \tilde{C}|_{\tilde{x}=R_0} = \tilde{C}^*. \quad (3)$$

При этом имеем искомый поток на условный «сток» вида:

$$D \frac{dC}{dx}|_{x=L} = Kl \frac{d\tilde{C}}{d\tilde{x}}|_{\tilde{x}=R} = Kl \sqrt{2\tilde{C}^* - \frac{2}{3}(\tilde{C}^*)^3} \quad (4)$$

и для его определения достаточно найти граничную концентрацию \tilde{C}^* . Заметим, что при $\tilde{x} = R_0$ соотношение (3) как раз и является уравнением для \tilde{C}^* . Рассмотрим два предельных случая. Первый, $R_0 \ll 1$. В этом случае из (3) следует, что $\tilde{C}^* \approx 1/2(R_0 - R)$, а из (4) –

$$D \frac{dC}{dx}|_{x=L} \approx Kl \sqrt{2\tilde{C}^*} = K(L_0 - L). \quad \text{Второй,}$$

$R_0 \gg 1$. Очевидно, что здесь $\tilde{C}^* \ll 1$, т.е. $\tilde{C}^* = 1 - \varepsilon$, где ε - малый параметр. В линейном приближении по ε из (3) нетрудно получить

$$\tilde{C}^* \approx 1 - 2 \exp\left(-\sqrt{2}(R_0 - R)\right), \quad \text{а из (4) -}$$

$$D \frac{dC}{dx} \Big|_{x=L} \approx Kl \frac{2}{\sqrt{3}}.$$

Введенный характерный масштаб l физически выделяет в уравнении (1) две области: в одной ($L \leq x < l$) из них доминирует диффузионное слагаемое, в другой ($l < x \leq L_0$) - существенную роль играет рекомбинация. Если $l \gg L_0$ ($R_0 \ll 1$), то роль рекомбинации в (1) пренебрежимо мала, и мы получаем очевидный результат: все что рождается в области $L \leq x < L_0$ поглощается «стоком». В случае $l < L_0$ ($R_0 > 1$) появляется область сильной рекомбинации. Здесь концентрационный профиль быстро выполаживается, выходя на значение \tilde{C}^* . Интерес, однако, представляет не концентрация, а ее квадрат. Дело в том, что производная от \tilde{C}^2 равна нулю на границах и положительна всюду внутри интервала $R < \tilde{x} < R_0$. Это означает, что она имеет точку максимума, а \tilde{C}^2 , соответственно, точку перегиба \tilde{x}_* : $\frac{d^2 \tilde{C}^2}{d\tilde{x}^2} \Big|_{\tilde{x}=\tilde{x}_*} = 0$. Ширина максимума определяет переходную область, слева от которой (ближе к «стоку») концентрация мала, а значит, роль рекомбинационного слагаемого не существенна, и им можно пренебречь. Справа (ближе к внешней границе) – мал градиент. Здесь концентрация меняется слабо, ее значение порядка \tilde{C}^* , поэтому $(1 - \tilde{C}^2) \approx (1 - \tilde{C})(1 + \tilde{C}^*)$. Интуитивно понятно, что масштаб порядка l находится именно в этой переходной области, где все слагаемые в (2) одного порядка. Предполагая далее, что ширина переходной области «достаточно» мала, мы предлагаем заменить исходную диффузионную задачу (2) на ее приближенный вариант:

$$\frac{d^2 \tilde{C}}{d\tilde{x}^2} + 1 = 0; \quad \tilde{C} \Big|_{\tilde{x}=0} = 0, \quad 0 \leq \tilde{x} \leq \tilde{x}_*; \quad (5)$$

$$\frac{d^2 \tilde{C}}{d\tilde{x}^2} + (1 - \tilde{C})(1 + \tilde{C}^*) = 0, \quad \frac{d\tilde{C}}{d\tilde{x}} \Big|_{\tilde{x}=R} = 0,$$

$$\tilde{x}_* \leq \tilde{x} \leq R,$$

а в качестве границы \tilde{x}_* , разделяющей упомянутые выше области, выбрать точку перегиба \tilde{C}^2 :

$$\left(\frac{d\tilde{C}}{d\tilde{x}} \right)^2 \Big|_{\tilde{x}=\tilde{x}_*} = \tilde{C} (1 - \tilde{C}^2) \Big|_{\tilde{x}=\tilde{x}_*}. \quad (6)$$

В первой области пренебрегли рекомбинационным слагаемым, а во второй – заменили нелинейную часть линейной, учитывая

пологость $\tilde{C}(\tilde{x})$ и малое отличие \tilde{C} от \tilde{C}^* . Уравнение (6) получено с учетом (2) и является математическим определением границы раздела областей. Недостающими уравнениями являются два условия сшивки в точке \tilde{x}_* : концентрации и потока.

Решения (5) имеют вид:

$$\tilde{C}(\tilde{x}) = \frac{1}{2} (R^2 - \tilde{x}^2) + b(\tilde{x} - R), \quad 0 \leq \tilde{x} \leq \tilde{x}_*;$$

$$\tilde{C}(\tilde{x}) = 1 - (1 - \tilde{C}^*) \operatorname{ch} \left[\sqrt{1 + \tilde{C}^*} (R_0 - \tilde{x}) \right],$$

$$\tilde{x}_* \leq \tilde{x} \leq R_0. \quad (7)$$

Условия сшивки концентраций и потоков в точке \tilde{x}_* определяют коэффициент b и граничную концентрацию \tilde{C}^* :

$$b = \tilde{x}_* + (1 - \tilde{C}^*) \sqrt{1 + \tilde{C}^*} \operatorname{sh} \left[\sqrt{1 + \tilde{C}^*} (R_0 - \tilde{x}_*) \right]; \quad (8)$$

$$\frac{1}{2} \tilde{x}_*^2 - R\tilde{x}_* - \left(1 - \frac{1}{2} R^2 \right) = -(1 - \tilde{C}^*) F(R, R_0, \tilde{x}_*, \tilde{C}^*); \quad (9)$$

$$F(R, R_0, \tilde{x}_*, \tilde{C}^*) =$$

$$= \sqrt{1 + \tilde{C}^*} (\tilde{x}_* - R) \operatorname{sh} \left[\sqrt{1 + \tilde{C}^*} (R_0 - \tilde{x}_*) \right] +$$

$$+ \operatorname{ch} \left[\sqrt{1 + \tilde{C}^*} (R_0 - \tilde{x}_*) \right],$$

а дополнительное физическое условие (6) дает уравнение для определения \tilde{x}_* . Сразу заметим, что правая часть (9) всегда отрицательна, поэтому мы имеем ограничение $\tilde{x}_* < R + \sqrt{2}$. Далее введем формально обозначение:

$$\alpha = (1 - \tilde{C}^*) \operatorname{ch} \left[\sqrt{1 + \tilde{C}^*} (R_0 - \tilde{x}_*) \right]. \quad \text{Тогда с}$$

учетом соотношения $\operatorname{ch}^2(x) - \operatorname{sh}^2(x) = 1$ уравнения (6), (9) принимают вид:

$$(1 + \tilde{C}^*) \left(\alpha^2 - (1 - \tilde{C}^*)^2 \right) = \alpha (1 - \alpha) (2 - \alpha); \quad (10)$$

$$\frac{1}{2} \tilde{x}_*^2 - \left(R - \sqrt{\alpha (1 - \alpha) (2 - \alpha)} \right) \tilde{x}_* -$$

$$- \left(1 - \frac{1}{2} R^2 - \alpha + R \sqrt{\alpha (1 - \alpha) (2 - \alpha)} \right) = 0. \quad (11)$$

Кубическое уравнение (10) имеет три вещественных корня для всех значений \tilde{C}^* в интервале $0 \leq \tilde{C}^* \leq 1$: один отрицательный и два положительных. Как следует из (11), физическим является корень, принадлежащий интервалу $0 \leq \alpha \leq 1$. И такой корень действительно есть для любого \tilde{C}^* , поэтому никаких противоречий не возникает. Из (11) имеем

$$\tilde{x}_* = R + \sqrt{\alpha(1-\alpha)(2-\alpha)} \left[\sqrt{1 + \frac{2}{\alpha(2-\alpha)}} - 1 \right] \equiv R + f(\alpha),$$

а из (10) находим α как функцию \tilde{C}^* ; подставляем в определение величины α и получаем уравнение для \tilde{C}^*

$$\alpha(\tilde{C}^*) = (1 - \tilde{C}^*) \operatorname{ch} \left[\sqrt{1 + \tilde{C}^*} (R_0 - R) + \sqrt{1 + \tilde{C}^*} f(\alpha(\tilde{C}^*)) \right] \quad (12)$$

решив которое, найдем все интересующие нас величины, в частности, поток на условный сток:

$$D \frac{dC}{dx} \Big|_{x=L} = Kl(\tilde{x}_* - R) + Kl\sqrt{\alpha(1-\alpha)(2-\alpha)}.$$

Последний, как видно, содержит два слагаемых. Первое имеет очевидный физический смысл: все что рождается в области $R < \tilde{x} < \tilde{x}_*$ поглощается «стоком», рекомбинацией здесь пренебрегаем. Второе – поток из области $\tilde{x}_* < \tilde{x} < R_0$, где рекомбинация играет существенную роль. Решить (12) в общем виде можно только численно. Поэтому рассмотрим предельный случай $R_0 \square R$, когда $\tilde{C}^* \square 1$. Заменяя в (10) \tilde{C}^* единицей, в нулевом приближении получаем:

$$\alpha = \frac{5 - \sqrt{17}}{2}; \quad \tilde{x}_* = R + f(\alpha);$$

$$f(\alpha) = \alpha\sqrt{2} \left(\sqrt{1 + \frac{1-\alpha}{\alpha^2}} - 1 \right); \quad (13)$$

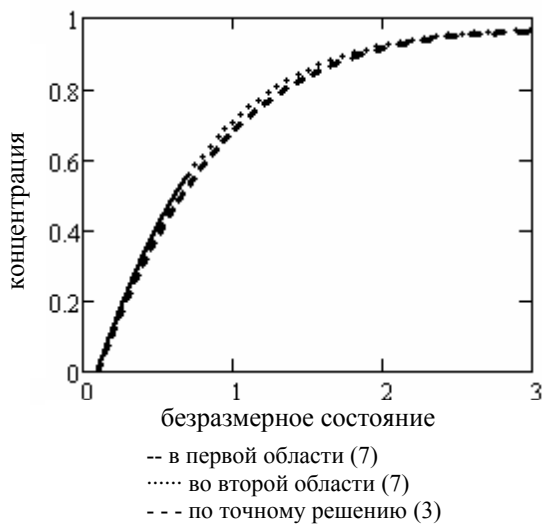


Рис. 1. Концентрация по приближенному (7) и точному (3) решениям для $R = 0.1$ и $R_0 = 3$

Посмотрим теперь какая ситуация с реальными стоками на примере сферической симметрии. Для такого типа стока приближенная диффузионная

$$D \frac{dC}{dx} \Big|_{x=L} = Kl(\tilde{x}_* - R) + Kl\alpha\sqrt{2} = Kl\alpha\sqrt{2} \sqrt{1 + \frac{1-\alpha}{\alpha^2}}$$

Следующее приближение дает

$$\tilde{C}^* \approx 1 - 2\alpha \exp(\sqrt{2}f(\alpha)) \exp(-\sqrt{2}(R_0 - R)). \quad (14)$$

Подставив его в (10), найдем поправку к α , \tilde{x}_* и

т.д. Заметим, что выражение для \tilde{C}^* (14) отличается от аналогичного выражения, полученного по точному решению (3) задачи (2), множителем $\alpha \exp(\sqrt{2}f(\alpha)) \approx 1.036$, а поток на условный «сток» (13) содержит множитель $\alpha\sqrt{2} \sqrt{1 + \frac{1-\alpha}{\alpha^2}} \approx 1.228$ в отличие от $2/\sqrt{3} \approx 1.155$, полученного ранее. Видно, что различия не существенны с учетом приближенного характера самих решений.

Для примера выберем $R = 0.1$ и $R_0 = 3$.

Численное решение (10)-(12) дает $\tilde{C}^* = 0.96$, $\tilde{x}_* = 0.704$; приближенные соотношения (13), (14) соответственно $\tilde{C}^* = 0.97$ и $\tilde{x}_* = 0.708$. Сравнение точного (3) и приближенного решений (7) для $\tilde{C}(\tilde{x})$ и $\tilde{C}(\tilde{x})^2$ приведено на рис. 1, 2. Графики, соответствующие приближенному решению, лежат чуть выше точного решения. Это указывает на то, что приближенная схема все же немного занижает роль рекомбинационного слагаемого.

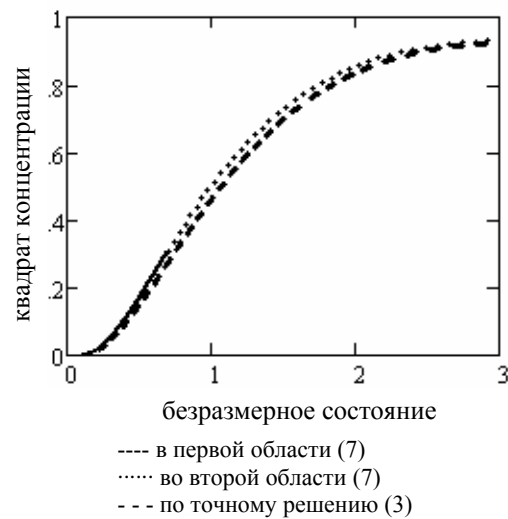


Рис. 2. Квадрат концентрации по приближенному (7) и точному (3) решениям для $R = 0.1$ и $R_0 = 3$

задача в области его влияния аналогично (5) формулируется следующим образом:

$$\frac{1}{x^2} \frac{d}{dx} \left(x^2 \frac{d\tilde{C}}{dx} \right) + 1 = 0; \quad \tilde{C}|_{x=\tilde{R}} = 0; \quad \tilde{R} \leq x \leq \tilde{x}_*; \quad x = r/l; \quad (15)$$

$$\frac{1}{x^2} \frac{d}{dx} \left(x^2 \frac{d\tilde{C}}{dx} \right) + (1 - \tilde{C})(1 + \tilde{C}^*) = 0; \quad \frac{d\tilde{C}}{dx} \Big|_{x=\tilde{R}_0} = 0; \quad \tilde{x}_* \leq x \leq \tilde{R}_0,$$

где \tilde{R} и \tilde{R}_0 – безразмерные радиус и размер области влияния стока; \tilde{C}^* – концентрация ТД на \tilde{R}_0 . Решения (15) имеют вид:

$$\tilde{C}(x) = \frac{1}{6}(\tilde{R}^2 - x^2) + b \left(\frac{1}{\tilde{R}} - \frac{1}{x} \right); \quad \tilde{R} \leq x \leq \tilde{x}_*; \quad (16)$$

$$\tilde{C}(x) = 1 - \frac{1 - \tilde{C}^*}{\sqrt{1 + \tilde{C}^*}} \frac{1}{x} \left\{ \tilde{R}_0 \sqrt{1 + \tilde{C}^*} \operatorname{ch} \left[\sqrt{1 + \tilde{C}^*} (\tilde{R}_0 - x) \right] - \operatorname{sh} \left[\sqrt{1 + \tilde{C}^*} (\tilde{R}_0 - x) \right] \right\};$$

$$\tilde{x}_* \leq x \leq \tilde{R}_0.$$

Сшивка концентраций и потоков в точке $x = \tilde{x}_*$ определяет константу b и дает уравнение для \tilde{C}^* :

$$b = \frac{\tilde{x}_*^3}{3} + \frac{1 - \tilde{C}^*}{\sqrt{1 + \tilde{C}^*}} \left[\varphi(\tilde{R}_0, \tilde{x}_*) \operatorname{ch} \left[\varphi(\tilde{R}_0, \tilde{x}_*) \right] + \left((1 + \tilde{C}^*) \tilde{x}_* \tilde{R}_0 - 1 \right) \operatorname{sh} \left[\varphi(\tilde{R}_0, \tilde{x}_*) \right] \right]; \quad (17)$$

$$\frac{1}{3\tilde{R}} \tilde{x}_*^3 - \frac{1}{2} \tilde{x}_*^2 - \left(1 - \frac{1}{6} \tilde{R}^2 \right) = - (1 - \tilde{C}^*) \Phi \left(\tilde{R}, \tilde{R}_0, \tilde{x}_*, (1 + \tilde{C}^*) \right); \quad (18)$$

$$\Phi = \frac{1}{\tilde{R} \sqrt{1 + \tilde{C}^*}} \left[\sqrt{1 + \tilde{C}^*} \left[\tilde{R}_0 - (\tilde{x}_* - \tilde{R}) \right] \operatorname{ch} \left[\varphi(\tilde{R}_0, \tilde{x}_*) \right] + \left[(1 + \tilde{C}^*) (\tilde{x}_* - \tilde{R}) \tilde{R}_0 - 1 \right] \operatorname{sh} \left[\varphi(\tilde{R}_0, \tilde{x}_*) \right] \right],$$

где $\varphi(\tilde{R}_0, \tilde{x}_*) = \sqrt{1 + \tilde{C}^*} (\tilde{R}_0 - \tilde{x}_*)$. Наконец, дополнительное физическое условие (оно же уравнение для точки сшивки) в данном случае имеет вид:

$$\left(\frac{d\tilde{C}}{dx} \right)^2 \Big|_{x=\tilde{x}_*} = \frac{2}{\tilde{x}_*} \left(\tilde{C} \frac{d\tilde{C}}{dx} \right) \Big|_{x=\tilde{x}_*} + \tilde{C} (1 - \tilde{C}^2) \Big|_{x=\tilde{x}_*}. \quad (19)$$

Отметим два момента. Во-первых, что $\Phi \left(\tilde{R}, \tilde{R}_0, \tilde{x}_*, (1 + \tilde{C}^*) \right) > 0$. Это обстоятельство, как и в рассмотренном выше случае, приводит к ограничению на \tilde{x}_* . Поскольку $\tilde{C}^* < 1$, то правая часть (18) положительная. Кубическое уравнение в левой части (18) имеет один действительный корень, поэтому значение \tilde{x}_* должно быть меньше значения этого корня. Во-вторых, \tilde{C}^* входит в уравнение для \tilde{x}_* (19) через комбинацию $(1 + \tilde{C}^*)$, что допускает схему последовательных приближений. Так, выразив из (18) сомножитель $(1 - \tilde{C}^*)$ и подставив его в (16), найдем концентрацию и ее производную в любой точке « x ». Затем подставим их в (19) и получим явное

уравнение для точки сшивки, в которое \tilde{C}^* будет входить через $(1 + \tilde{C}^*)$. В нулевом приближении можно положить $(1 + \tilde{C}^*) = 2$, и тогда (19) определит нам \tilde{x}_* . Это значение подставим в (18) и найдем уточненное значение для \tilde{C}^* и т.д. Оказывается, что, если $\tilde{R}_0 \gg \tilde{R}$, достаточно одной итерации, поскольку значение \tilde{x}_* практически не чувствительно к малым изменениям \tilde{C}^* . Такова схема численного счета. Аналитическое рассмотрение возможно лишь в предельном случае $\tilde{R}_0 \square \tilde{x}_*$, когда справедливо следующее приближение:

$$\operatorname{ch} \left[\sqrt{1 + \tilde{C}^*} (\tilde{R}_0 - \tilde{x}_*) \right] \approx \operatorname{sh} \left[\sqrt{1 + \tilde{C}^*} (\tilde{R}_0 - \tilde{x}_*) \right] \approx 1/2 \exp \left[\sqrt{1 + \tilde{C}^*} (\tilde{R}_0 - \tilde{x}_*) \right]. \quad (20)$$

Можно проверить, что при этом имеет место простое соотношение

$$\left(\frac{d\tilde{C}}{dx}\right)_{|x=\tilde{x}_*} = (1-\tilde{C}(x))_{|x=\tilde{x}_*} \left(\sqrt{1+\tilde{C}^*} + \frac{1}{\tilde{x}_*}\right), \quad (21)$$

связывающее концентрацию в точке сшивки с ее производной, а сама концентрация имеет вид:

$$\tilde{C}(x)_{|x=\tilde{x}_*} = 1 + \frac{\tilde{R}}{\tilde{x}_*} F(\tilde{R}, \tilde{x}_*, \tilde{C}^*); \quad (22)$$

$$F(\tilde{R}, \tilde{x}_*, \tilde{C}^*) = \left[\frac{1}{3\tilde{R}} \tilde{x}_*^3 - \frac{1}{2} \tilde{x}_*^2 - \left(1 - \frac{1}{6} \tilde{R}^2\right) \right] \left(\sqrt{1+\tilde{C}^*} (\tilde{x}_* - \tilde{R}) + 1 \right)^{-1}.$$

Подставляя (21) и (22) в (19), получаем следующее уравнение:

$$-3 \frac{\tilde{R}}{\tilde{x}_*} F(\tilde{R}, \tilde{x}_*, \tilde{C}^*) = 2 + \tilde{R} \sqrt{1+\tilde{C}^*} F + \tilde{x}_*^2 \left(1 + \frac{\tilde{R}}{\tilde{x}_*} F\right) \left(2 + \frac{\tilde{R}}{\tilde{x}_*} F\right) \left(\tilde{x}_* \sqrt{1+\tilde{C}^*} + 1\right)^{-1}. \quad (23)$$

Если предположить, что \tilde{x}_* пропорционален \tilde{R} , то, учитывая что $\tilde{R} < 1$, в нулевом приближении получаем $F \approx -1$, а $\tilde{x}_* \approx (3/2)\tilde{R}$. Что касается \tilde{C}^* , то для нее из (18) имеем уравнение

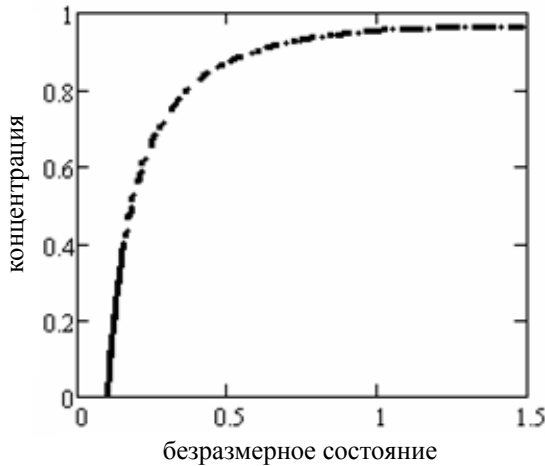
$$\tilde{C}^* = 1 + \frac{2\tilde{R}\sqrt{1+\tilde{C}^*}}{\tilde{R}_0\sqrt{1+\tilde{C}^*}-1} F(\tilde{R}, \tilde{x}_*, \tilde{C}^*) \exp\left[-\sqrt{1+\tilde{C}^*}(\tilde{R}_0 - \tilde{x}_*)\right], \quad (24)$$

поэтому поправка к единице будет иметь вид

$$\tilde{C}^* = 1 - \frac{2\sqrt{2}\tilde{R}}{\tilde{R}_0\sqrt{2}-1} \exp\left[-\sqrt{2}(\tilde{R}_0 - 3/2\tilde{R})\right].$$

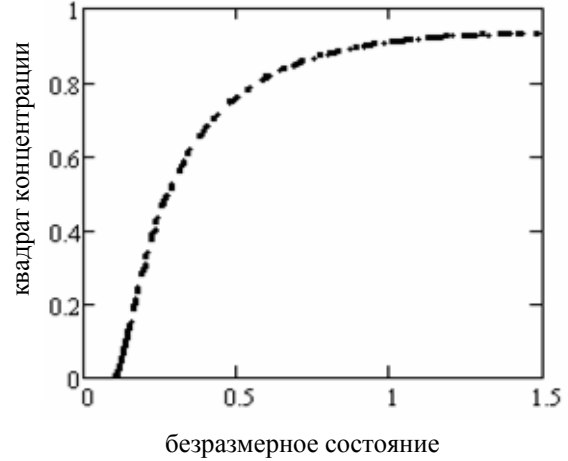
В качестве примера положим $\tilde{R} = 0.1$, а $\tilde{R}_0 = 1.5$. Численный счет по уравнениям (18), (19) дает $\tilde{x}_* = 0.149$ и $\tilde{C}^* = 0.966$, численный счет по уравнениям (22), (23) – $\tilde{C}^* = 0.964$ и то же значение для точки сшивки, наконец, последнее соотношение дает $\tilde{C}^* = 0.963$. Видно, что выбранное приближение (20) достаточно удачное. В данном случае точного аналитического решения у

нас нет, поэтому сравнивать (16) можно лишь с численным решением исходной нелинейной диффузионной задачи. Это решение нам предоставил доктор физико-математических наук Туркин А.А. в частном порядке. Сравнение этого решения с приближенным (модельным) (16) приведено на рис. 3, 4. Согласие хорошее, и это позволяет надеяться на то, что предложенный способ учета рекомбинации может быть использован при вычислении потоков ТД на стоки уже в реальных физических задачах радиационной физики.



--- точный численный расчет
 — в первой области (16)
 ... - во второй области (16)

Рис. 3. Концентрация по приближенному решению (16) и точному численному счету исходной нелинейной диффузионной задачи в сферической симметрии для $\tilde{R} = 0.1$ и $\tilde{R}_0 = 1.5$



--- точный численный расчет
 — в первой области (16)
 ... - во второй области (16)

Рис. 4. Квадрат концентрации по приближенному решению (16) и точному численному счету исходной нелинейной диффузионной задачи в сферической симметрии для $\tilde{R} = 0.1$ и $\tilde{R}_0 = 1.5$

Под реальными имеются в виду, прежде всего, задачи с учетом упругого взаимодействия ТД со стоками. По этой причине в данной работе отсутствует случай с цилиндрической симметрией, связанной с дислокациями, для которых оно имеет принципиальное значение. Кроме того, здесь размер области влияния стока считается заданным. На самом деле он должен определяться самосогласованным образом [2,3].

Авторы благодарны НТЦУ за частичную финансовую поддержку работы по проекту № 4962.

ЛИТЕРАТУРА

1. A.D. Brailsford, R. Bullough. The theory of sink strengths // *Philos. Trans of Roy. Soc.* 1981, v. A302, p. 87-137.
2. В.В. Слезов. Диффузионная скорость роста макродефектов в ансамблях // *ФТТ.* 1989, т.31, №8, с.20-30.
3. В.В. Слезов. П.Н. Остапчук. К теории вакансионного распухания металлов. I. Радиационные потоки точечных дефектов на пору и дислокацию // *ФТТ.* 1990, т.32, №10, с.3047-3053.

Статья поступила в редакцию 13.09.2010 г.

МЕТОД УРАХУВАННЯ РЕКОМБІНАЦІЇ ТОЧКОВИХ ДЕФЕКТІВ У ТЕОРІЇ ДИФУЗІЙНИХ ПРОЦЕСІВ В КРИСТАЛАХ ПІД ОПРОМІНЕННЯМ

В.В. Сльозов, П.М. Остапчук

Запропоновано спосіб приблизного урахування квадратичного додатку рекомбінаційного типу у дифузійній задачі в області впливу стоку. Суть його полягає у наступному: поблизу границі стоку цим додатком, як і раніше, нехтуємо в силу малості концентрації точкових дефектів; поблизу границі області впливу нелінійну частину дифузійного рівняння приблизно ліанеризуємо в силу малості градієнта концентрації. В якості точки зшивки концентрації та потоку пропонується вибрати точку перегину квадрату концентрації. Порівняння точних та приблизних рішень наведено для лінійної та сферично симетричної задач.

METHOD OF INTRODUCING BULK RECOMBINATION OF POINT DEFECTS IN THE RATE THEORY OF CRYSTALS UNDER IRRADIATION

V.V. Slezov, P.N. Ostapchuk

A method of taking into account the quadratic term responsible for the bulk recombination of point defects in the diffusion problem in the sink region of influence is proposed. It is based on linearization of the diffusion equation near the vicinity of the boundary of the sink region of influence, where the concentration gradient is sufficiently small. The approximate analytical solution agrees very well with the exact numerical one for the spherically symmetrical case and with exact analytical one for the linear case.