МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ТЕМПЕРАТУРЫ НА ОБРАЗОВАНИЕ ТРЕКОВ БЫСТРЫХ ТЯЖЕЛЫХ ИОНОВ В КАРБИДЕ КРЕМНИЯ

Д.И. Зайнутдинов1,2,\*), А.Е. Волков2,3

1) НИЯУ МИФИ , Москва, Российская Федерация

2) ФИАН им. П.Н. Лебедева РАН, Москва, Российская Федерация

3)НИЦ “Курчатовский институт”, Москва, Российская Федерация

\*)e-mail: d.zaynutdinov@lebedev.ru

Гибридная многомасштабная модель применена для описания структурных изменений в нанометрической окрестности траектории быстрого тяжелого иона (трек БТИ) в нагретом карбиде кремния (фаза 6H-SiC). Модель объединяет две части. Код Монте-Карло TREKIS [1–3] моделирует суб-пикосекундное возбуждение электронной и атомной подсистем материала в треке. Затем эволюция возбужденной решетки в треке БТИ моделируется с помощью пакета классической молекулярной динамики LAMMPS [4]. Модель предсказывает начало формирования аморфных треков БТИ в монокристалле SiC при повышении температуры окружающей среды до 700 K для ионов U с энергией 1 ГэВ и до 1600 K для ионов Xe с энергией 167 МэВ. Обсуждается температурная зависимость радиуса трека.

ЛИТЕРАТУРА

1. Medvedev N.A. et al., J. Phys. D.: Appl. Phys., 2016, Vol. 49, № 36, P. 21–22.

2. Medvedev N.A. et al., J. Phys. D.: Appl. Phys., 2015, Vol. 48, № 35, 355303

3. Rymzhanov R.A. et al., Nucl. Instruments Methods Phys. Res. Sect. B, 2016. Vol. 388, P. 41–52.

4. Plimpton S., J Comp Phys., 1995, Vol. 117, P. 1–19.