МОДЕЛИРОВАНИЕ ОТКЛИКА НАНОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ДИЭЛЕКТРИКОВ НА ОБЛУЧЕНИЕ БЫСТРЫМИ ТЯЖЕЛЫМИ ИОНАМИ

Р.А. Рымжанов1,2,\*), А.Е. Волков3,4)

1) Институт ядерной физики, Алматы, Казахстан;

2) ОИЯИ, Дубна, Россия;

3) ФИАН, Москва, Россия;

4) НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия;

\*) e-mail: rymzhanov@jinr.ru

В настоящей работе оригинальная мультимасштабная модель применялась для описания структурных повреждений в нанокристаллических диэлектриках, облученных быстрыми тяжелыми ионами, тормозящимися в режиме электронных потерь энергии. Подход объединяет Монте-Карло код TREKIS [1], отслеживающий возбуждение электронов и передачу энергии атомам, с молекулярной динамикой, моделирующей релаксацию возбуждённой решетки [2] в нанометрической окрестности траектории иона (трек). В работе анализируется и сравнивается отклик на облучение аморфизуемых и неаморфизуемых нанокристаллических мишеней. Рекристаллизация повреждённой области в треке, наблюдаемая в неаморфизуемых MgO и Al2O3, значительно влияет на границы зерен, что приводит к объединению и укрупнению наночастиц [3]. Сильный нагрев и расширение материала в центральной части трека может привести к образованию пустот вблизи границ зерен. Подобно массивным мишеням, пролет тяжелых ионов в аморфизуемом образце практически не влияет на морфологию зерен, формируя аморфные треки. Показано, что наличие локальных напряжений в зернах может влиять на размеры формируемых треков.

Исследование финансировалось Министерством образования и науки Республики Казахстан (грант AP09259476).

ЛИТЕРАТУРА

1. N.A. Medvedev et al. // Journal of Physics D, 2015, 48, 355303

2. R.A. Rymzhanov et al. // Scientific Reports, 2019, 9, 3837

3. R.A. Rymzhanov et al. // Computational Material Science, 2023, *in press.*