

Моделирование отклика нанокристаллических диэлектриков на облучение быстрыми тяжелыми ионами

Р.А. Рымжанов^{1,2,*}, А.Е. Волков^{3,4}

¹⁾ Институт ядерной физики, Алматы, Казахстан; ²⁾ ОИЯИ, Дубна, Россия; ³⁾ ФИАН, Москва, Россия; ⁴⁾ НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия; *rymzhanov@jinr.ru

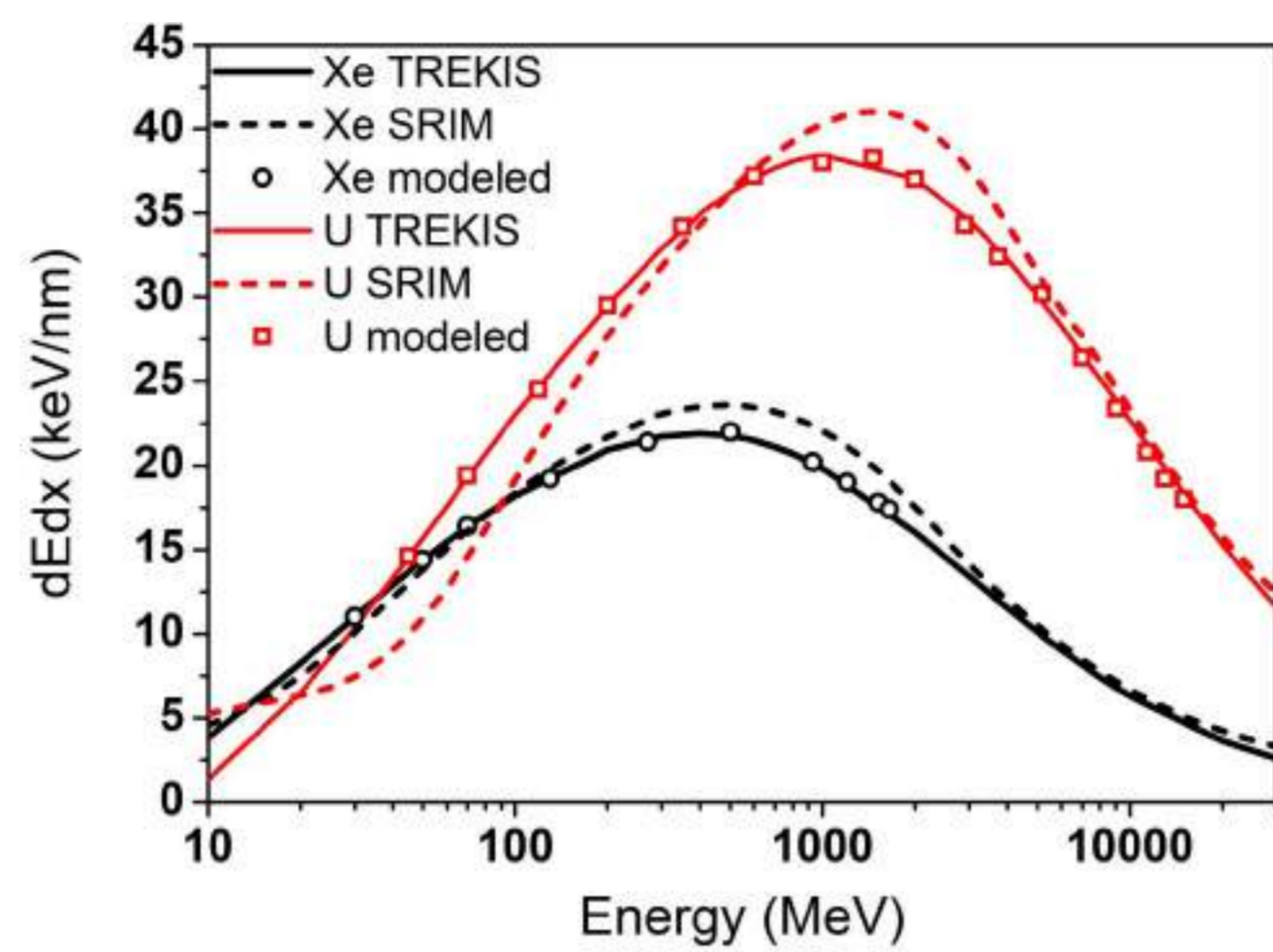
Введение

Быстрые тяжелые ионы (БТИ)

$$E_{\text{ion}} > 1 \text{ MeV/u}; \quad M_{\text{ion}} > 10m_p; \quad S_e > 1 \text{ кэВ/нм}$$

Исследование процессов образования треков БТИ важно для:

- Нанотехнологических приложений
- Моделирования воздействия осколков деления
- Моделирования воздействия космических лучей



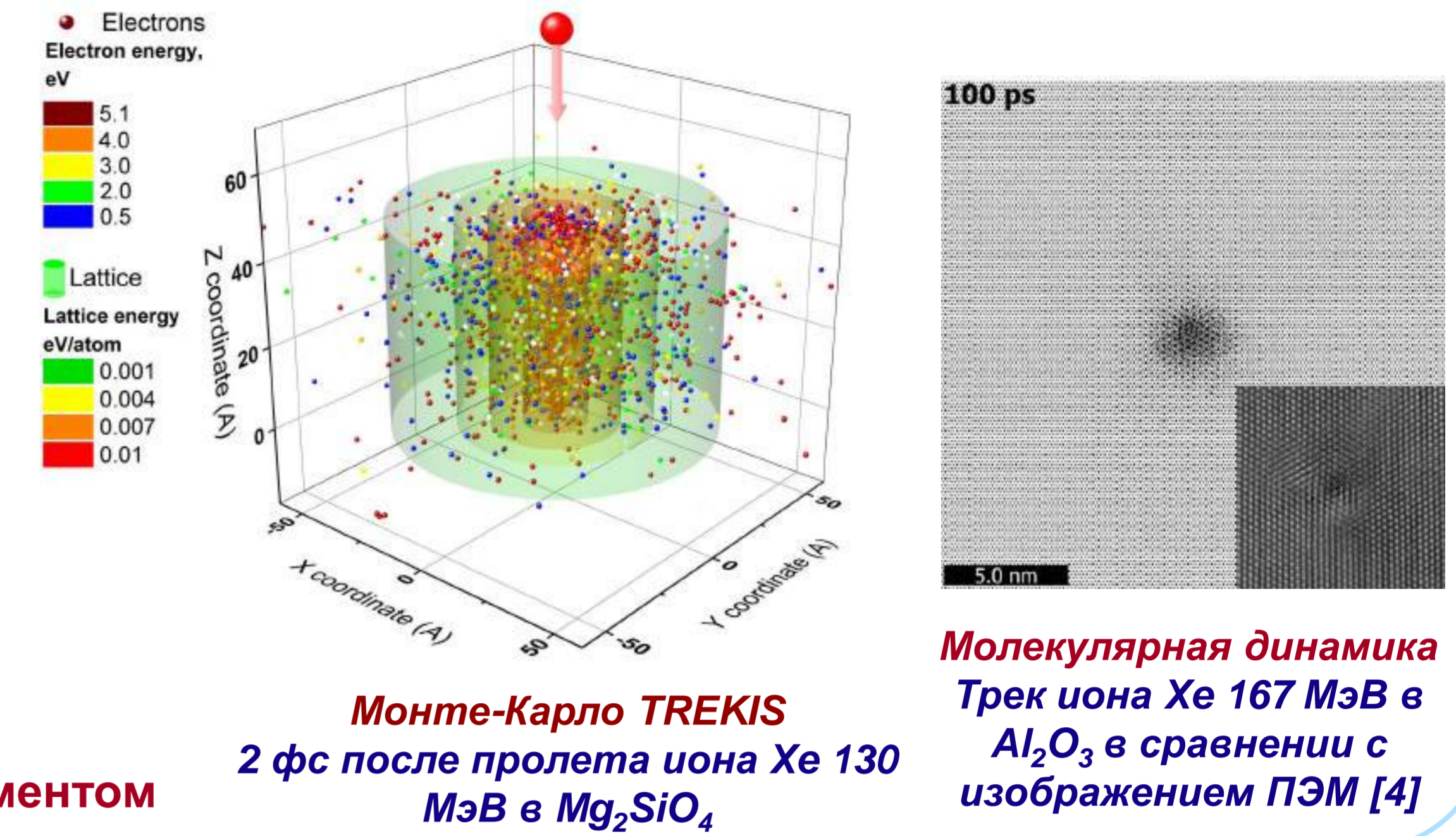
Гибридная мультимасштабная модель [1]

а) Монте-Карло моделирование прохождения БТИ и каскадов вторичных электронов (TREKIS [2])

б) Возбуждение электронной подсистемы и решетки, описываемое в рамках формализма комплексной диэлектрической функции и динамического структурного фактора.

в) Молекулярная динамика (МД) структурных изменений в решетке (LAMMPS [3])

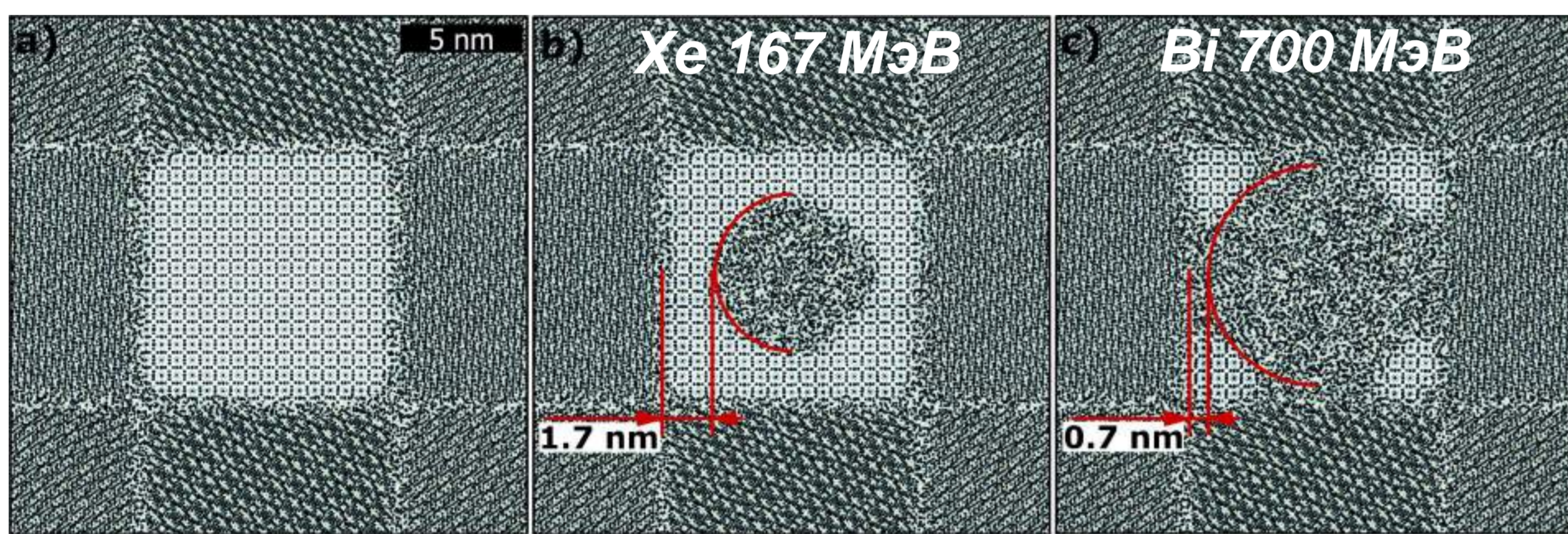
Хорошее согласие с экспериментом



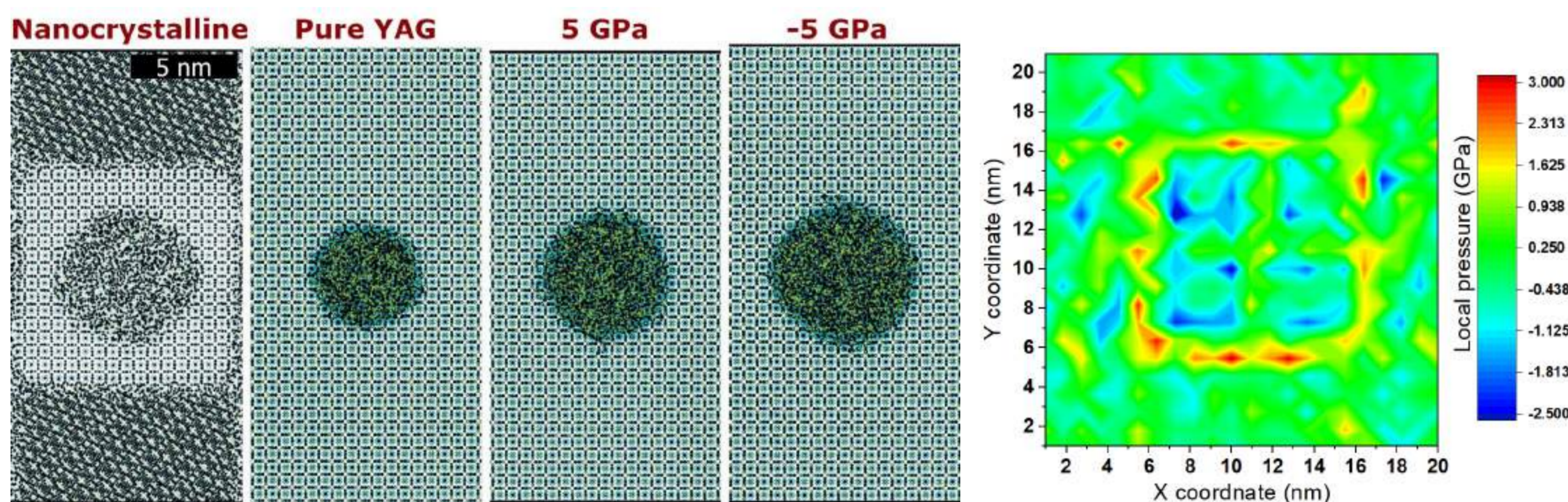
Монте-Карло TREKIS
2 фс после пролета иона Xe 130 МэВ в Mg_2SiO_4

Молекулярная динамика
Трек иона Xe 167 МэВ в Al_2O_3 в сравнении с изображением ПЭМ [4]

nc-YAG



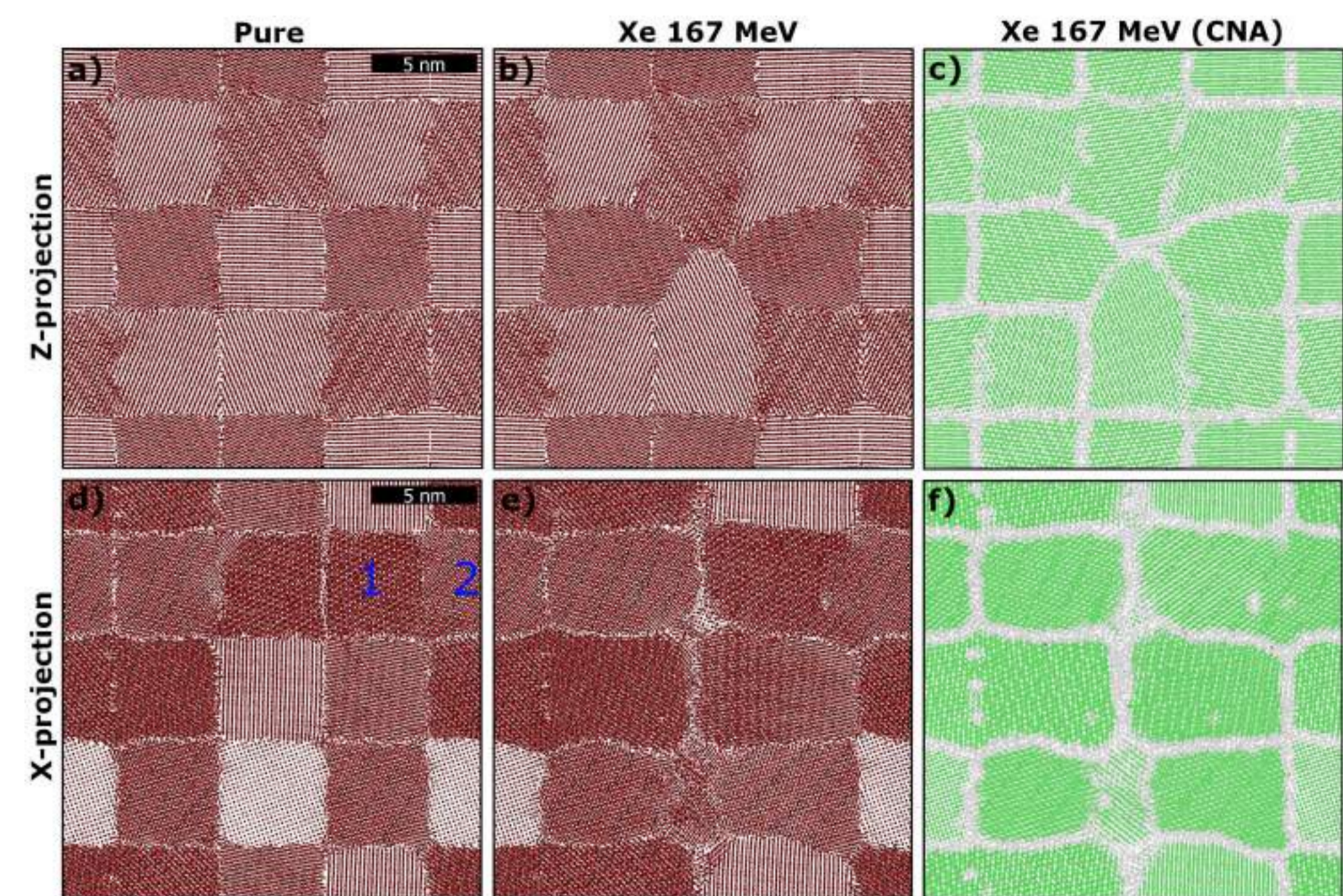
В аморфизируемом $Y_3Al_5O_{12}$ (YAG) прохождение иона слабо влияет на морфологию границ зерен.



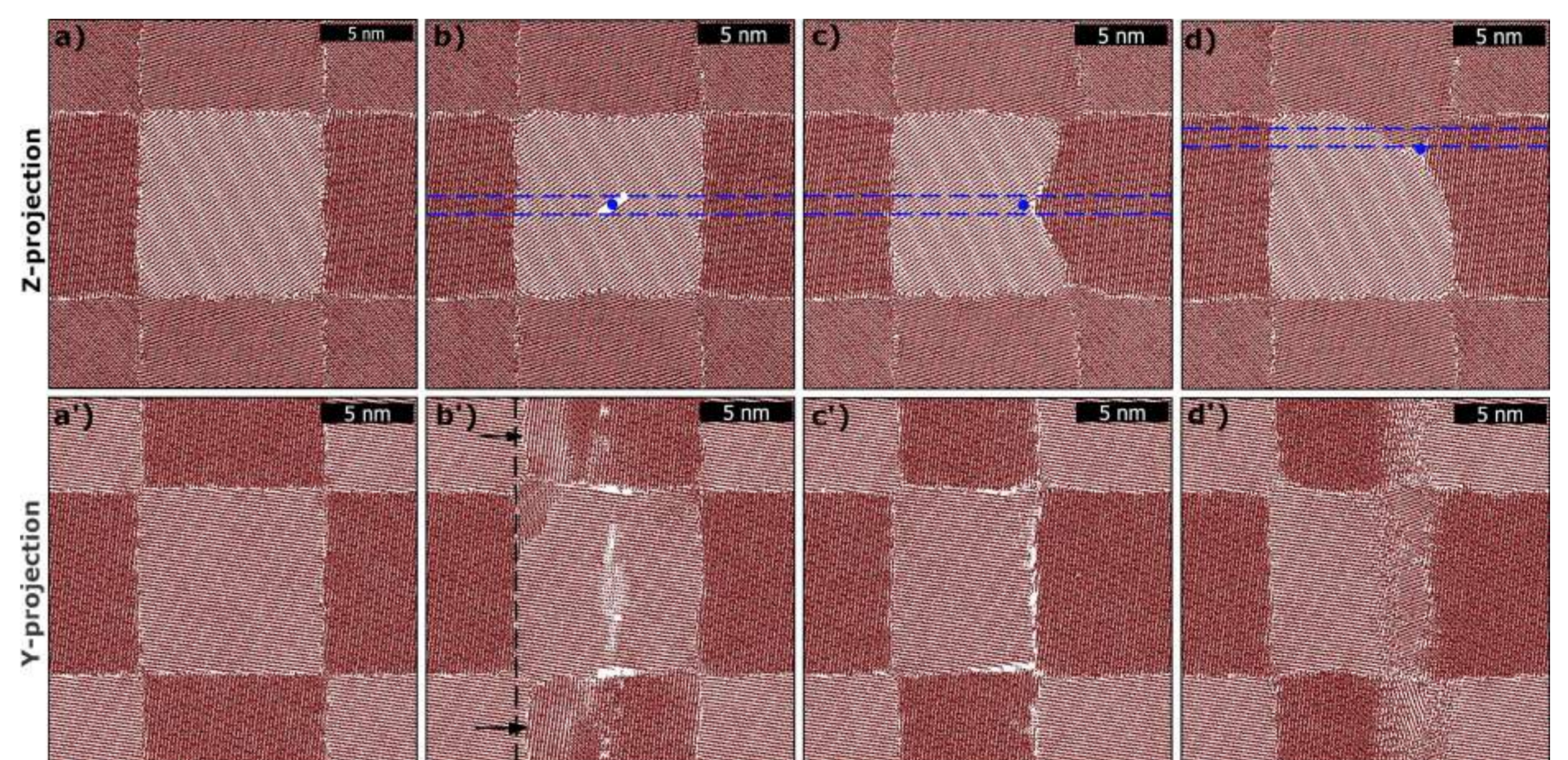
Размер трека в нанокристаллическом YAG больше чем в объемных образцах, что объясняется наличием локальных напряжений в нанозернах

nc-MgO

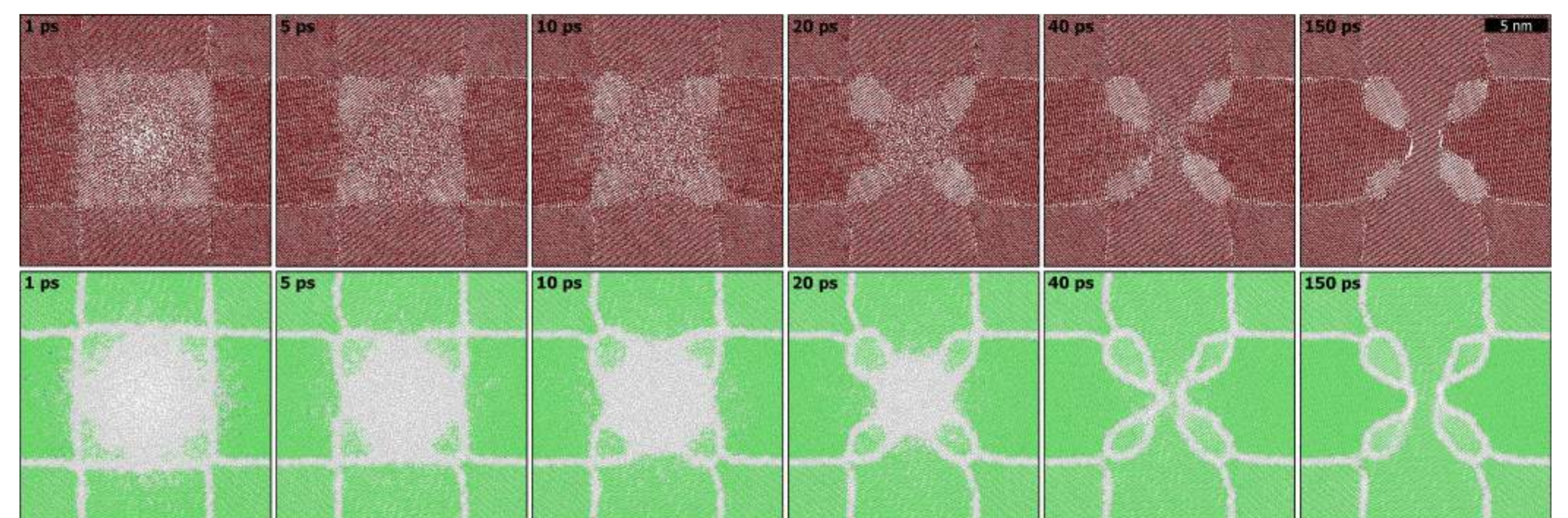
Xe 167 МэВ в нанокристаллическом оксиде магния



В неаморфизируемом MgO рекристаллизация трековой области может приводить к укрупнению зерен за счет объединения зерен при движении фронта рекристаллизации, а также за счет термически-активированного вращения зерен и миграции их границ на периферии трека

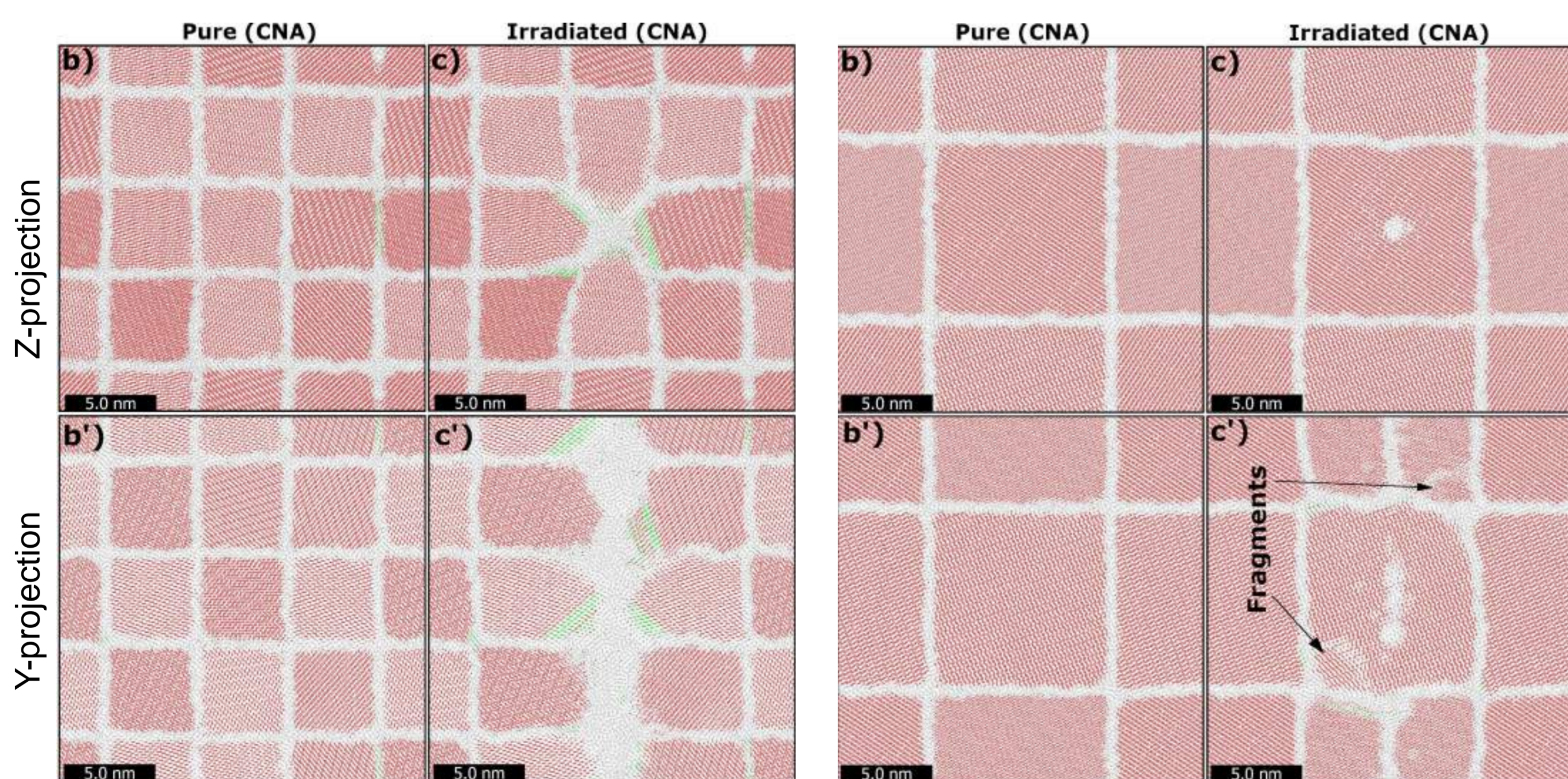


Кинетика трека Bi 700 МэВ в нанокристаллическом MgO



Процессы рекристаллизации поврежденной ионом области могут образовывать необычные структуры, если размеры расплавленной области сравнимы с размером зерна

Xe 167 МэВ в nc-Al₂O₃



Значительные напряжения, возникающие в области трека могут приводить к фрагментации зерен

Заключение

Процессы рекристаллизации в MgO и Al_2O_3 значительно и крайне быстро (в течение 100 пс) влияют на морфологию зерен активирова следующие процессы:

- 1) укрупнение зерен за счет миграции границ и поворота соседних зерен, инициированное сильным нагревом на периферии трека иона;
- 2) укрупнение зерен в результате разупорядочения ядра трека, дальнейшей рекристаллизации и эпитаксиального роста соседних зерен;
- 3) фрагментация зерен из-за сильного нагрева и расширения материала на периферии трека.

Аморфизируемые нанокристаллические мишени (YAG) демонстрируют менее выраженное взаимодействие с границами зерен из-за отсутствия рекристаллизации.

Литература

- [1] R.A. Rymzhanov, N.A. Medvedev, A.E. Volkov, NIMB 388 (2016) 41-52
- [2] N.A. Medvedev, R.A. Rymzhanov, A.E. Volkov, JPhysD. 48 (2015) 355303
- [3] S. Plimpton, J. Comput. Phys. 117 (1995) 1-19
- [4] R.A. Rymzhanov et al. Sci. Rep. 9 (2019) 3837
- [5] R.A. Rymzhanov, A. E. Volkov, A.D. Ibrayeva, Comp. Mat. Sci. 221 (2023) 112078