

# Кинетика повреждения в треках быстрых тяжелых ионов в полиэтилене

52-ая Международная Тулиновская конференция по Физике Взаимодействия Заряженных Частиц с кристаллами, 2023

П.А. Бабаев\*<sup>1</sup>, Ф.О. Ахметов<sup>2</sup>, С.А. Горбунов<sup>1</sup>, Н.А. Медведев<sup>3</sup>, Р.А. Рымжанов<sup>4</sup>, Р.А. Воронков<sup>1</sup> и А.Е. Волков<sup>1,6</sup>



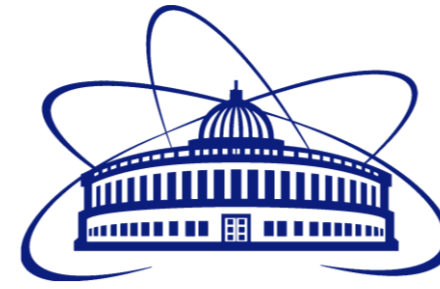
1) ФИАН им. П.Н. Лебедева



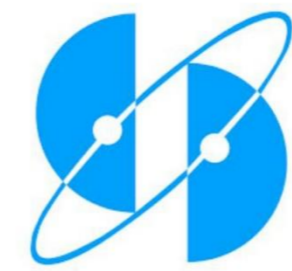
2) Университет Твенте



3) Академия наук Чешской Республики



4) ОИЯИ



5) ИЯФ РК



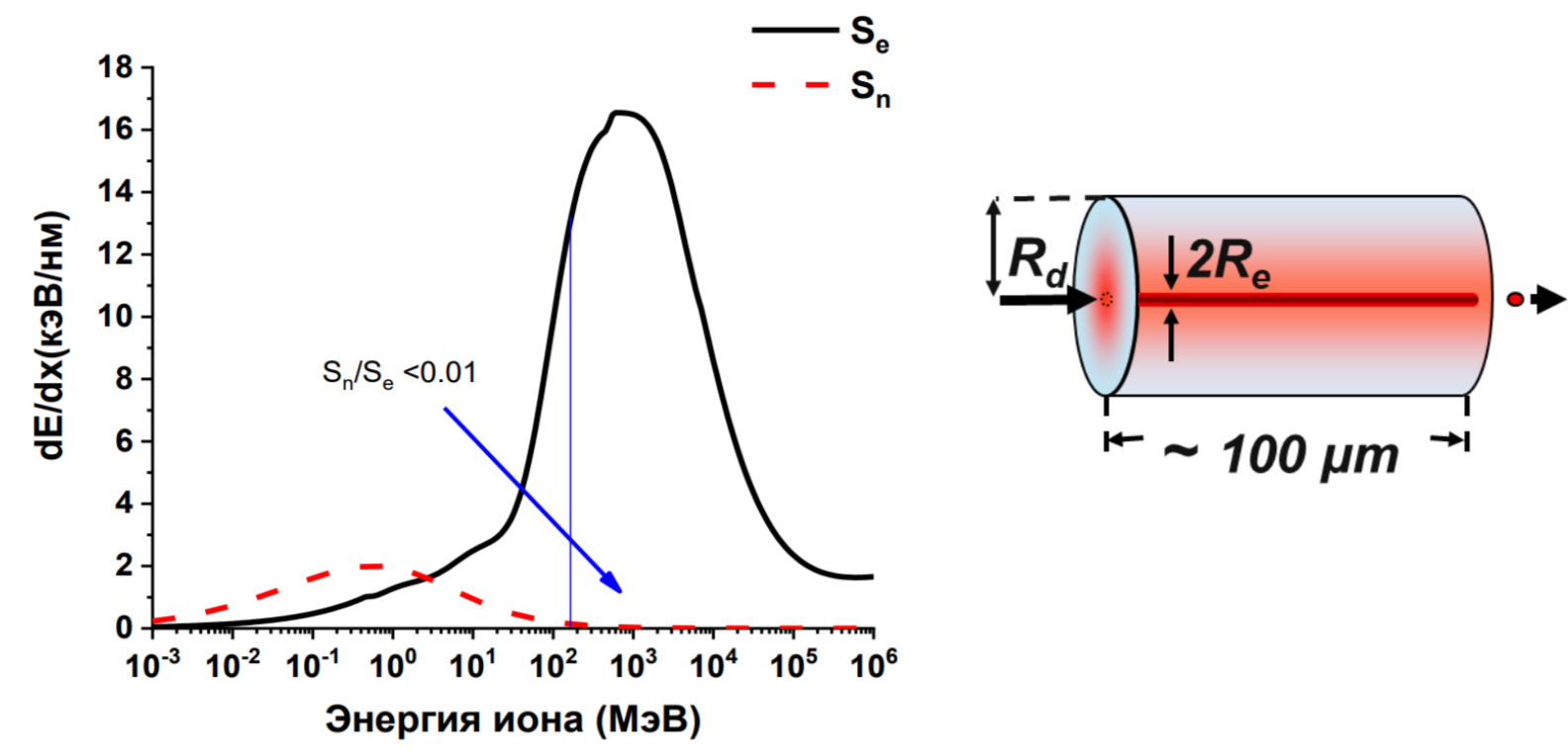
6) НИЦ «КИ»

\* babaevpa@lebedev.ru

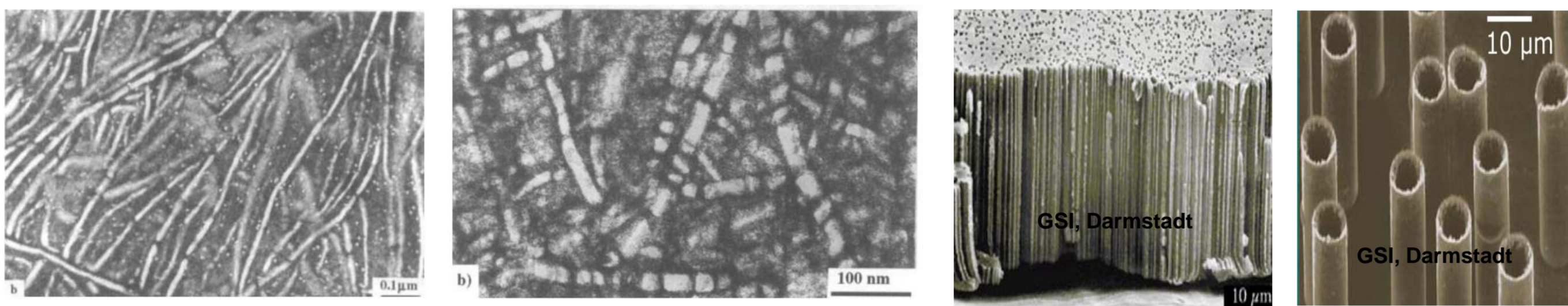
## 1. Быстрые тяжелые ионы (БТИ)

Торможение на электронной подсистеме

$E_{ion} > 1 \text{ МэВ/нукл}$   
 $M_{ion} > 10 m_p$   
 $S_e > 1 \text{ кэВ/нм}$



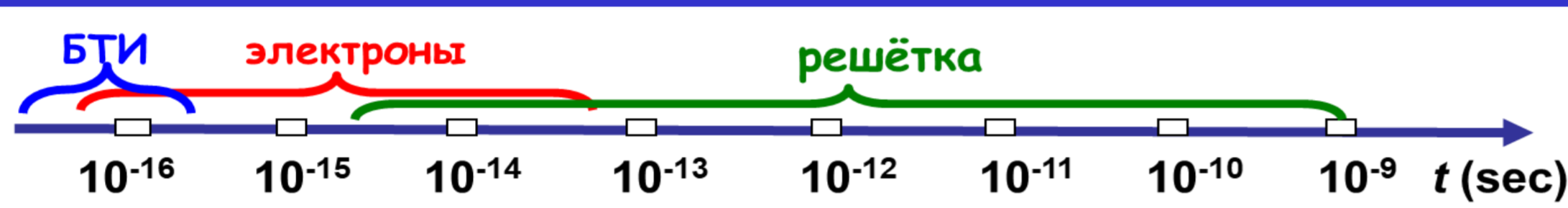
## 2. Облучение полиэтилена [1]



Облучение Хе 11.4 МэВ/нукл — химический краситель + ПЭМ

Трековые мембраны

## 3. TREKIS + LAMMPS [2,3]

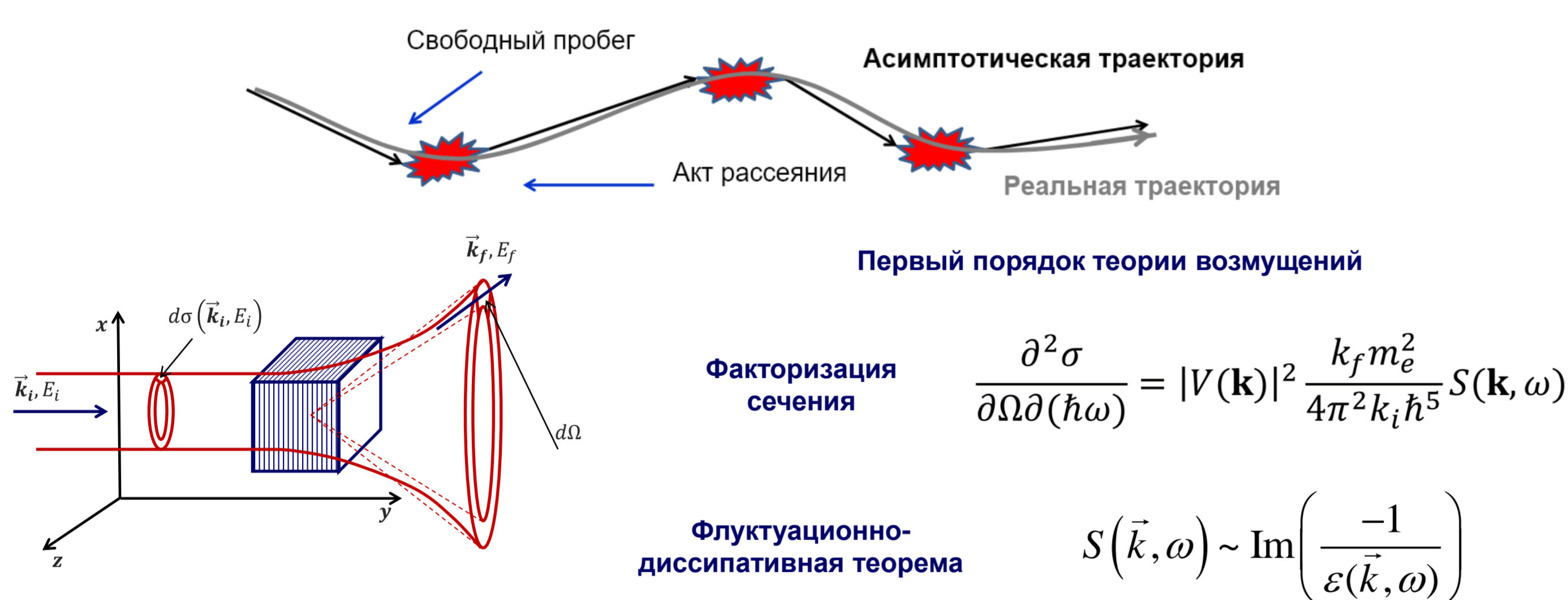


Разделение по времени — мультимасштабная модель

Монте-Карло код TREKIS

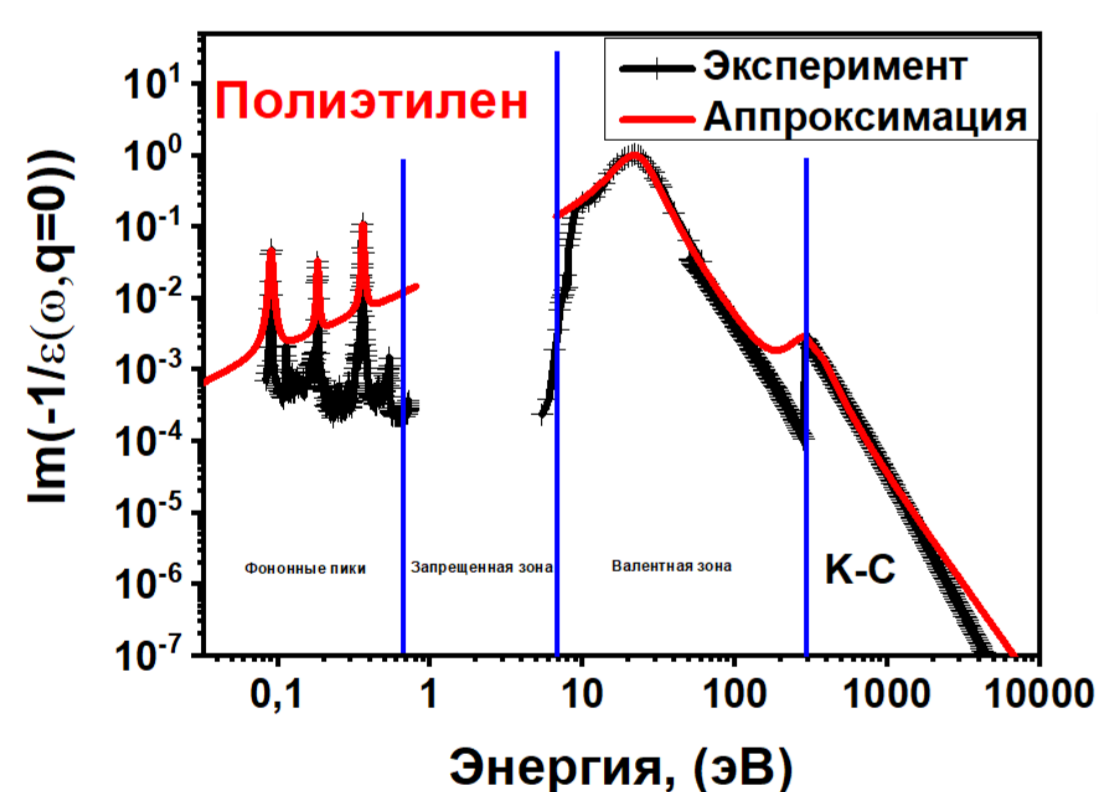
Пошаговое МК моделирование

Марковская цепь: время акта рассеяния << времени свободного пробега



$$\frac{\partial^2 \sigma}{\partial \Omega \partial (\hbar \omega)} = |V(\mathbf{k})|^2 \frac{k_f m_e^2}{4\pi^2 k_i \hbar^5} S(\mathbf{k}, \omega)$$

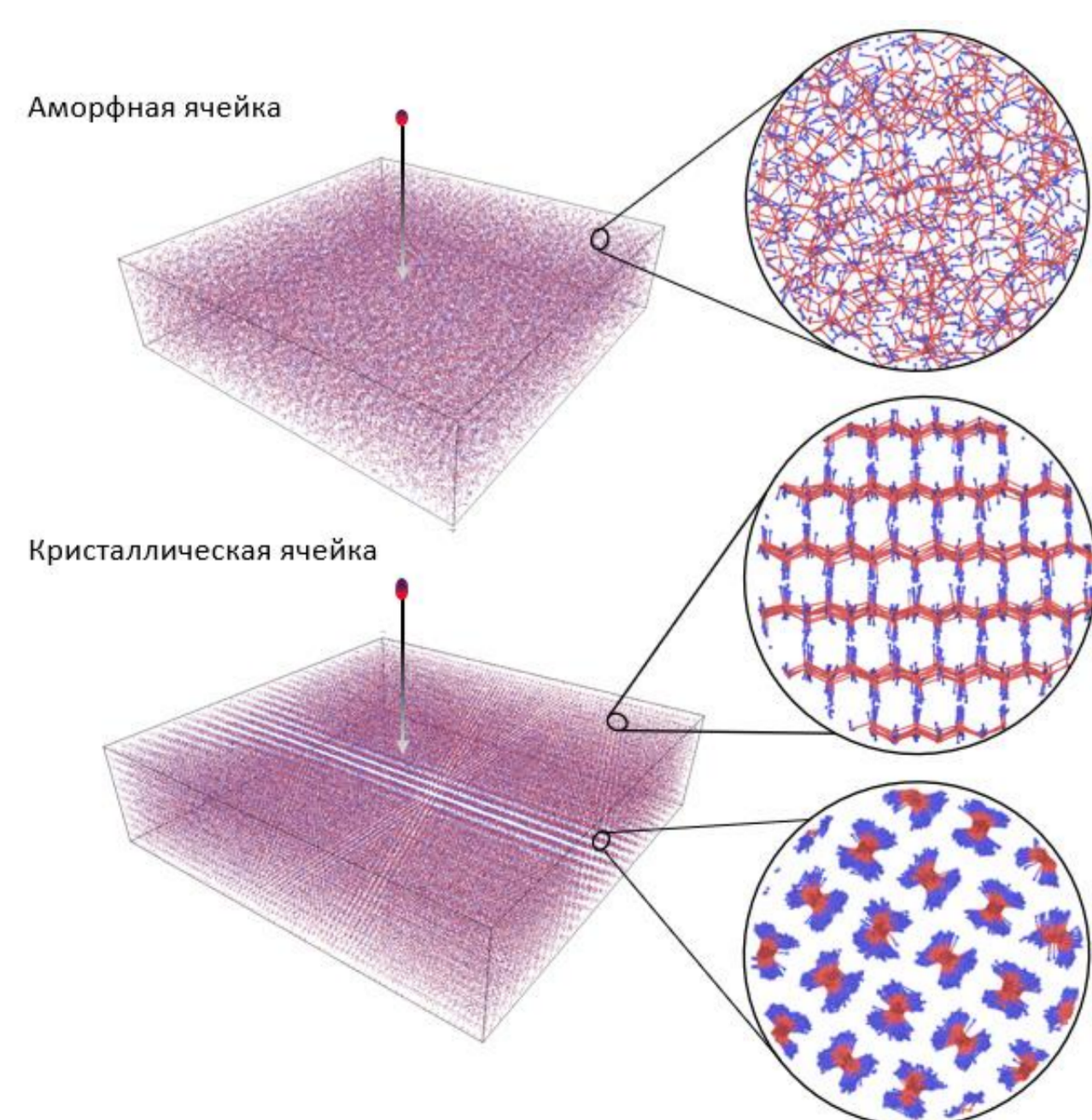
$$S(\vec{k}, \omega) \sim \text{Im} \left( \frac{-1}{\varepsilon(\vec{k}, \omega)} \right)$$



$$\frac{d^2 \sigma}{d(\hbar \omega) d(\hbar q)} = \frac{2(Z_{eff}(v)e)^2}{n_{at} \pi \hbar^2 v^2} \frac{1}{\hbar q} \left[ 1 - \exp\left(-\frac{\hbar \omega}{k_B T}\right) \right]^{-1} \text{Im} \left( \frac{-1}{\varepsilon(\omega, q)} \right)$$

Восстанавливается из эксперимента

МД LAMMPS

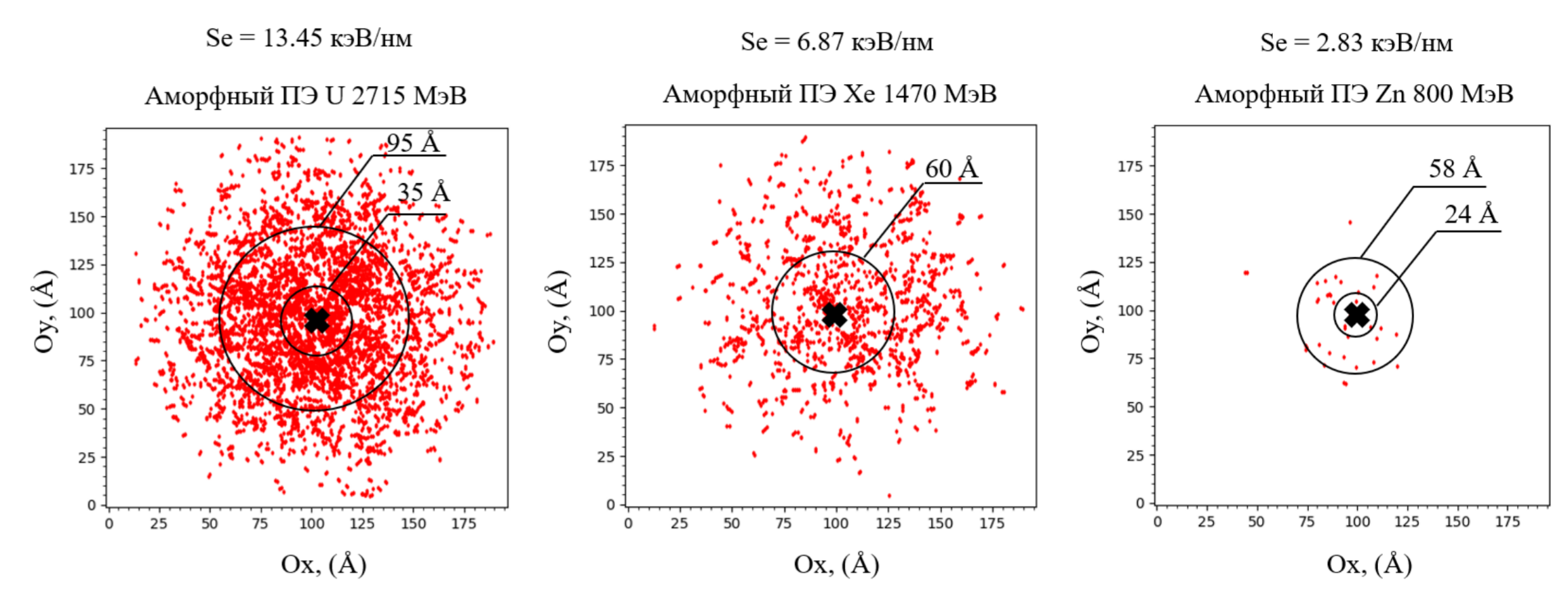


AIREBO-M

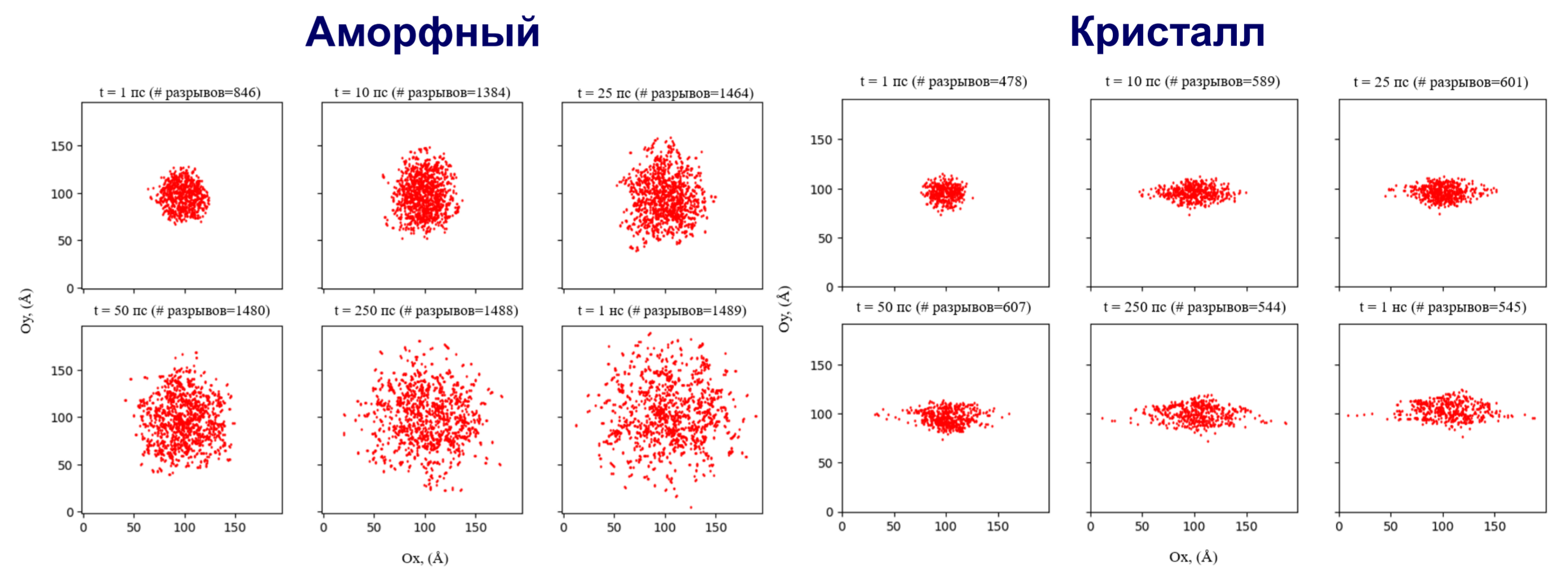
- a) Реактивный потенциал
- b) устойчивость к ударным воздействиям
- c) нет зарядов

лучше учет ударных волн

## 4. Аморфный и кристаллический ПЭ

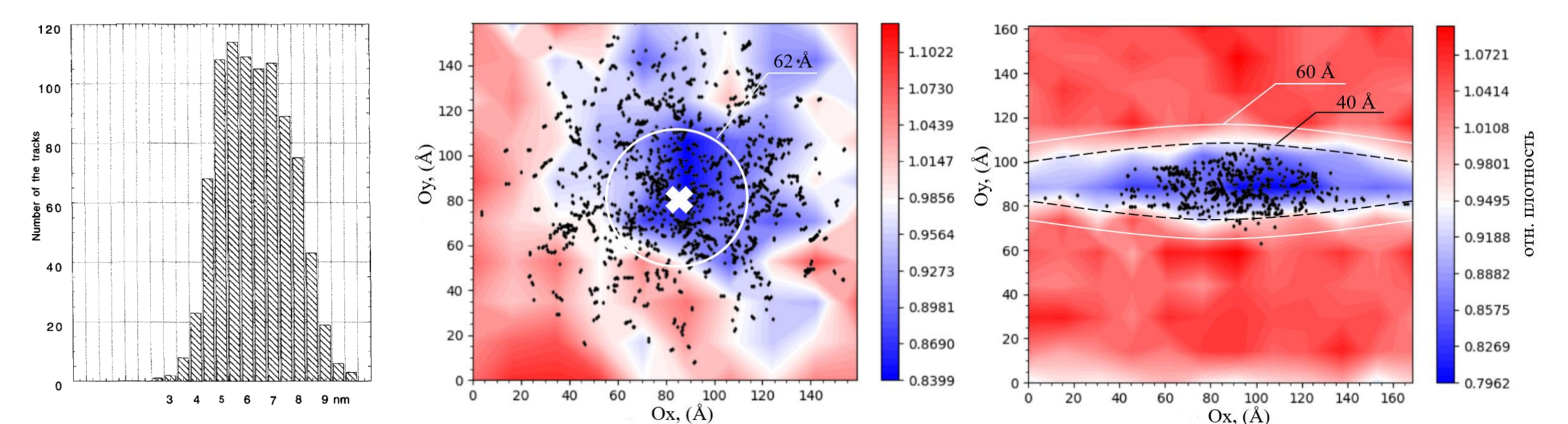


Остывание до ~ 1 нс

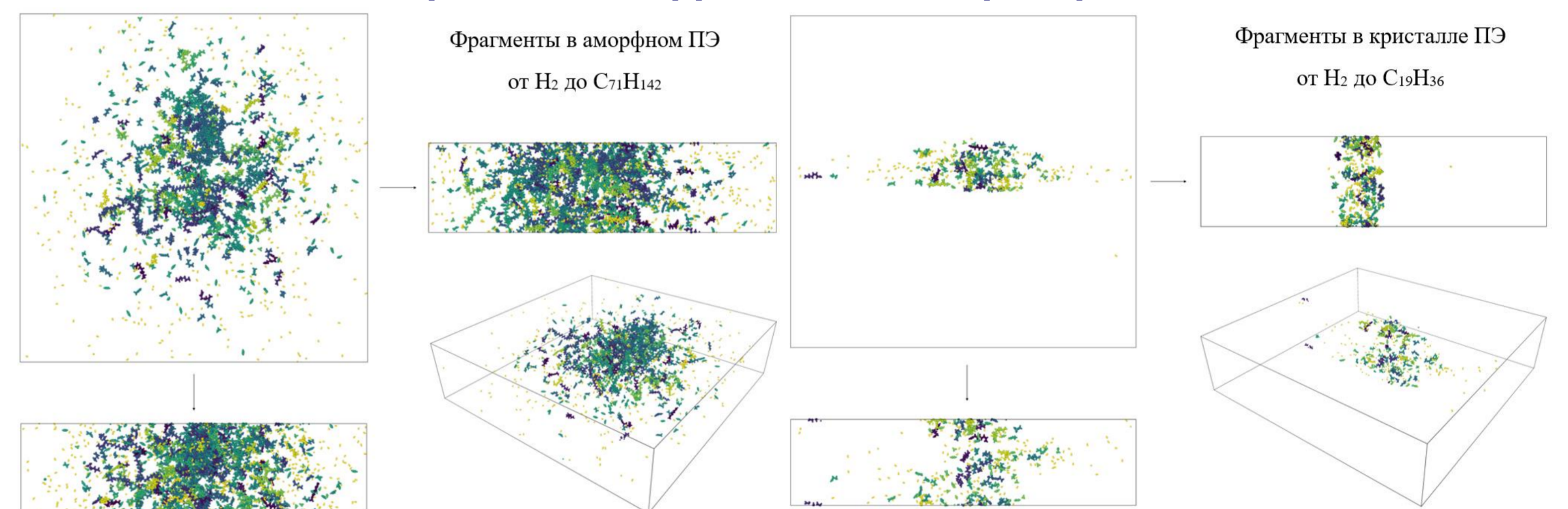


Область пониженной плотности совпадает с разрывами

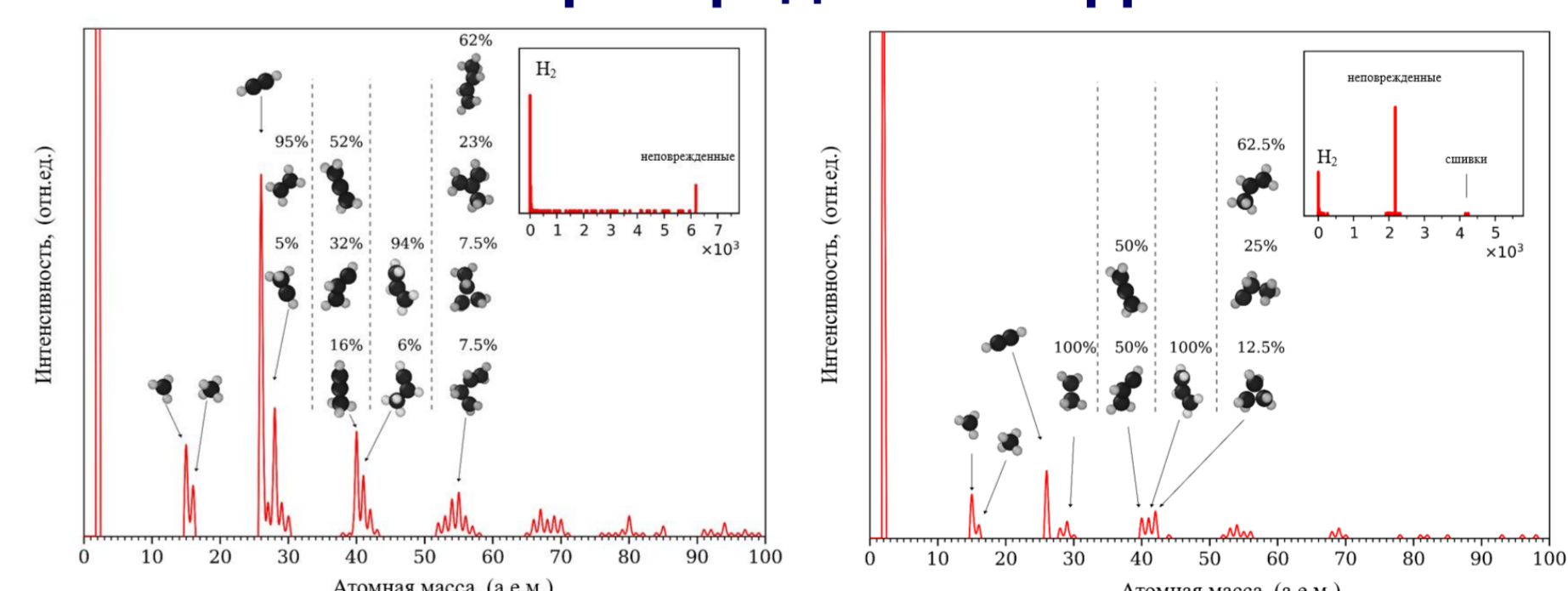
Вытянутый трек в кристалле ПЭ



Распределение фрагментов в пространстве

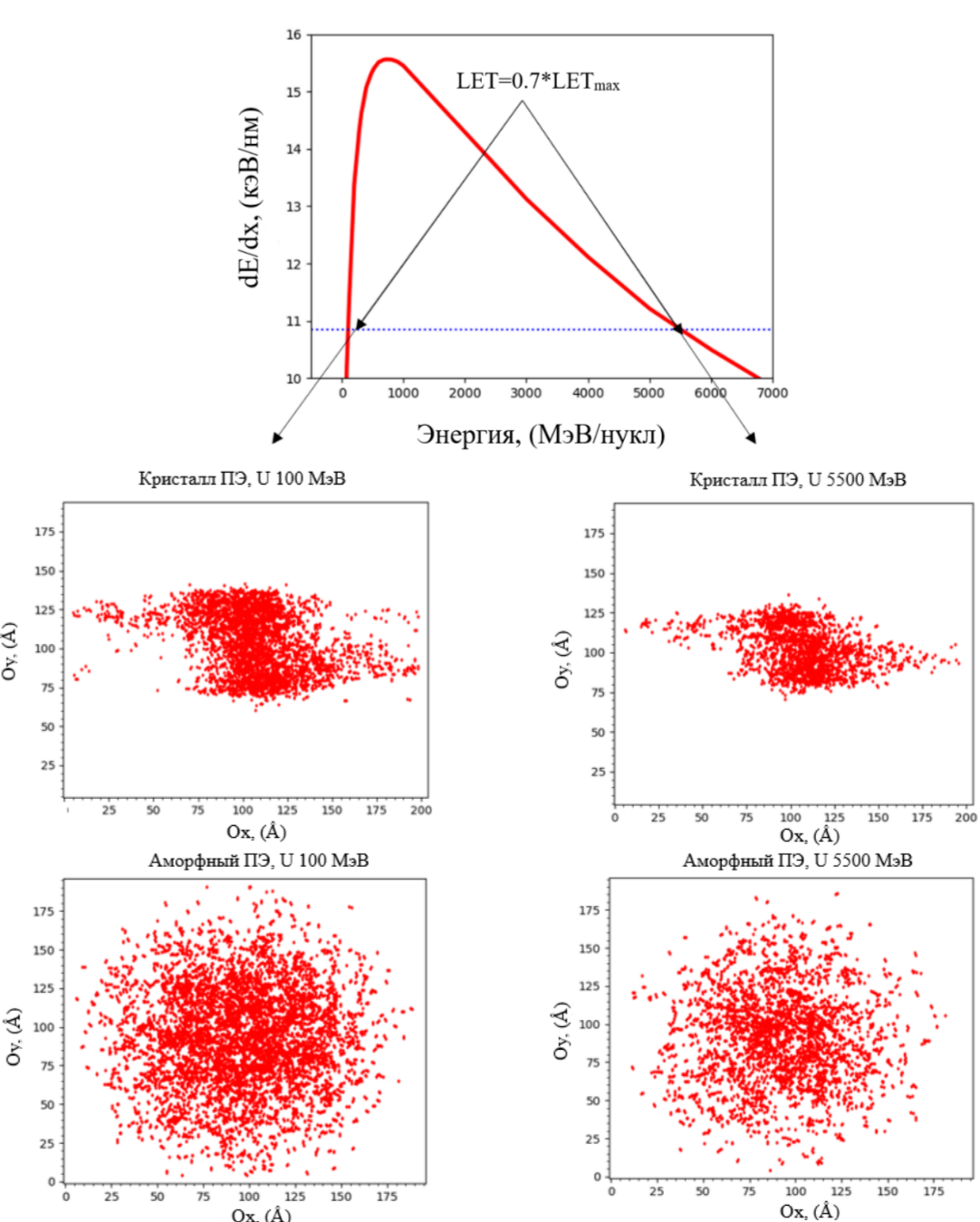


Массовое распределение фрагментов



## 5. Эффект скорости

ЛПЭ одинаково, скорости БТИ- разные



## 6. Литература

- [1] J. Vetter et al, Radiation Effects and Defects in Solids, 1998, Volume 143, 273-286
- [2] N.A. Medvedev et al 2015 J. Phys. D: Appl. Phys. 48 355303
- [3] S. Plimpton, Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics, J Comp Phys, 117, 1-19 (1995)
- [4] J. Chem. Phys. 142, 024903 (2015)
- [5] Journal of Applied Physics 133, 100701 (2023)
- [6] L. Van Hove, Phys. Rev. 95 (1954) 249-262
- [7] R.A. Rymzhanov et al., Nucl. Instr. Meth. B (2016)

## 7. Результаты и выводы

- Морфология: круглый трек ~ 60 Å в аморфном; вытянутый трек в кристалле
- Получены пространственное распределение фрагментов и масс-спектр
- Начальные условия для модели химической активации трека