

Моделирование влияния температуры на образование треков быстрых тяжелых ионов в карбиде кремния

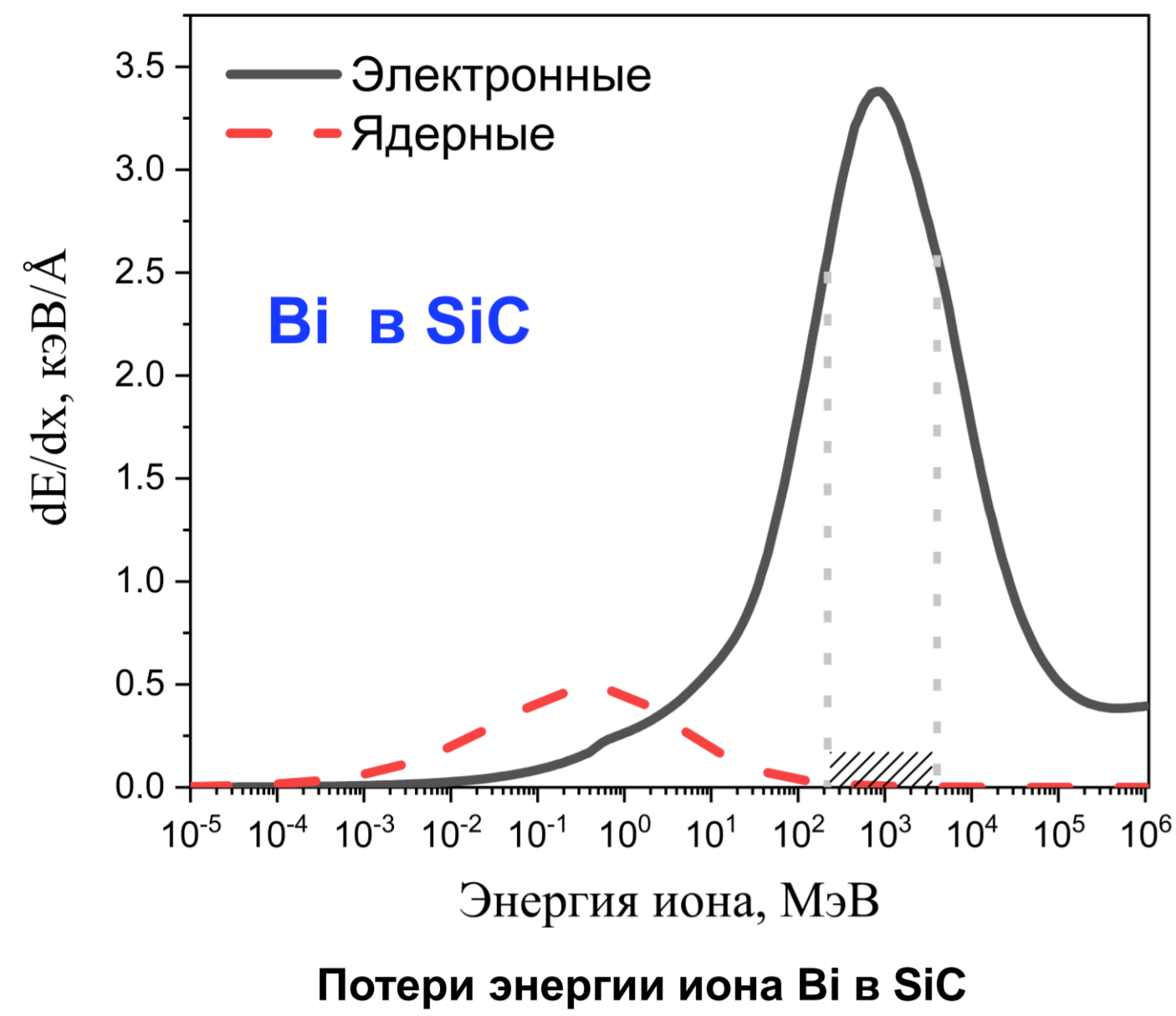
52-я Международная Тулиновская конференция по Физике Взаимодействия Заряженных Частиц с Кристаллами, 2023

Д.И. Зайнутдинов^{* 1}, Р.А. Воронков¹, С.А. Горбунов¹, Н.А. Медведев^{2,3}, Р.А. Рымжанов^{4,5}, М.В. Сорокин⁶,
А.Е. Волков^{1,4,6}

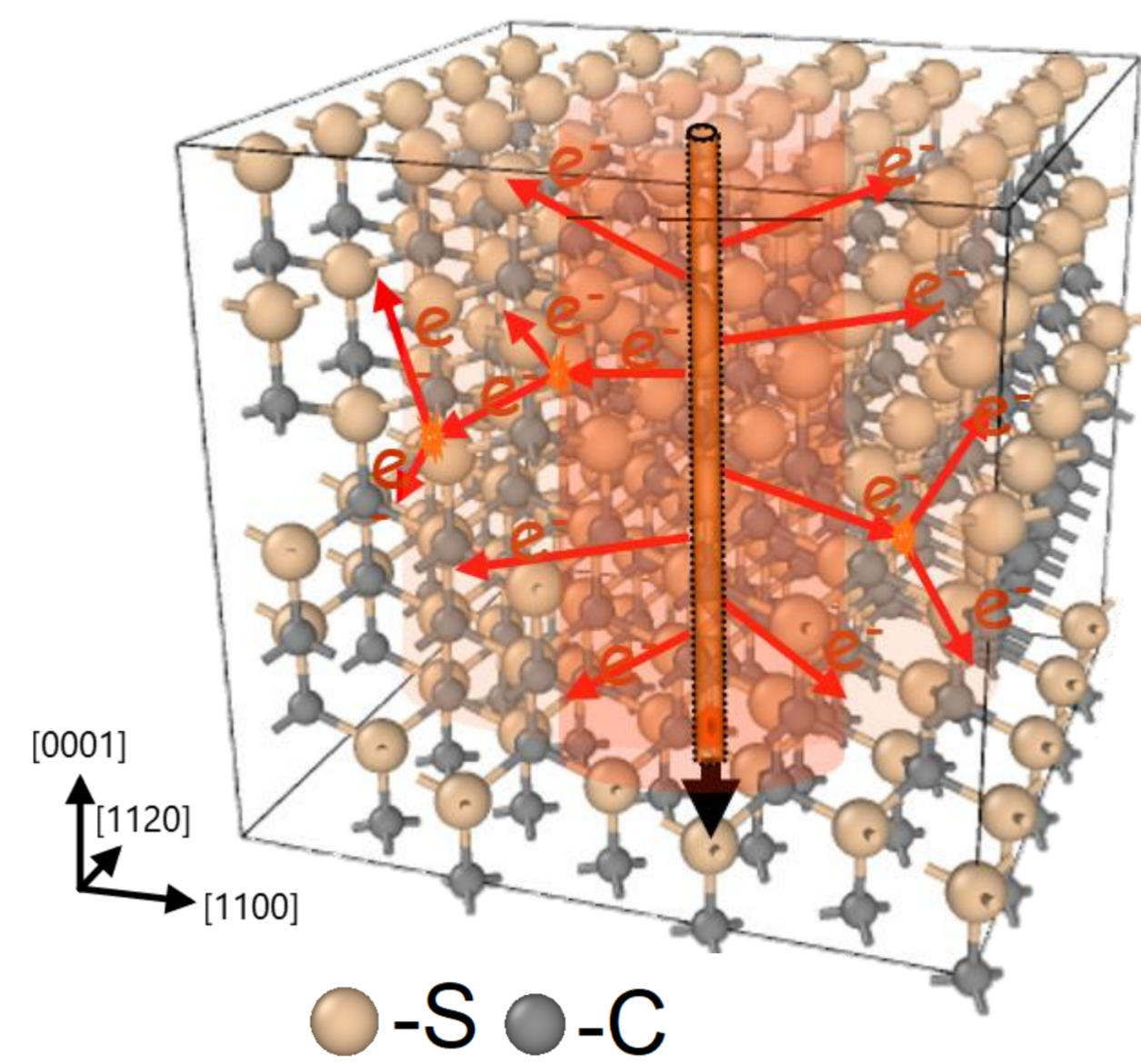


* d.zaynutdinov@lebedev.ru

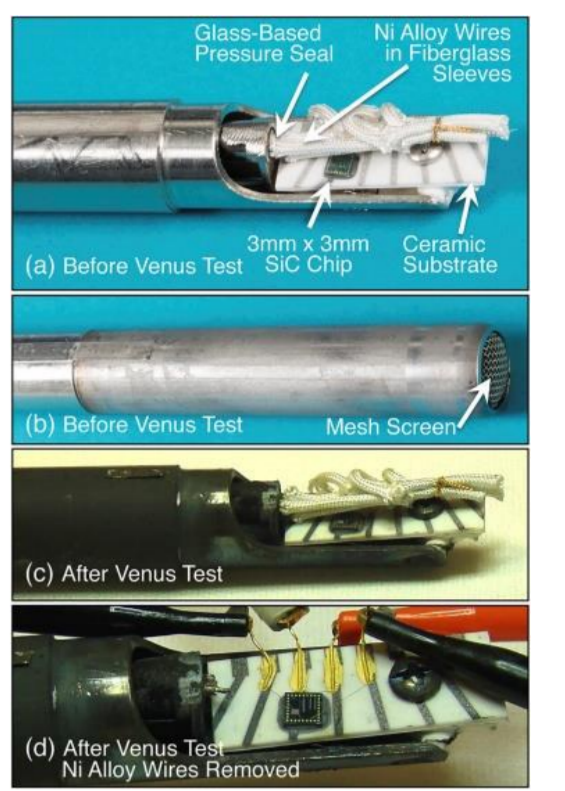
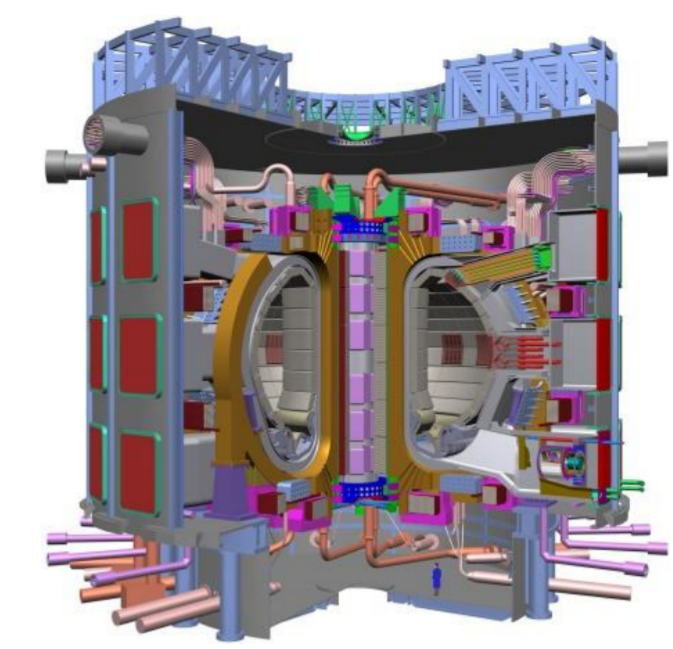
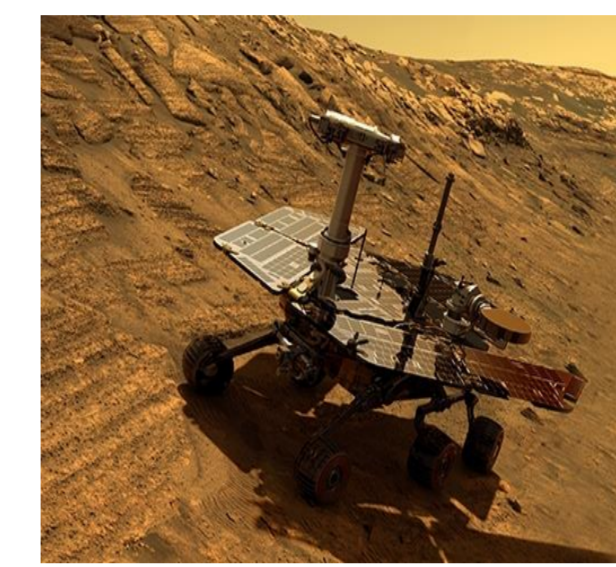
1. Введение



$E_{ion} = 1-10$ МэВ/нукл. и $M_{ion} > 10 m_p$

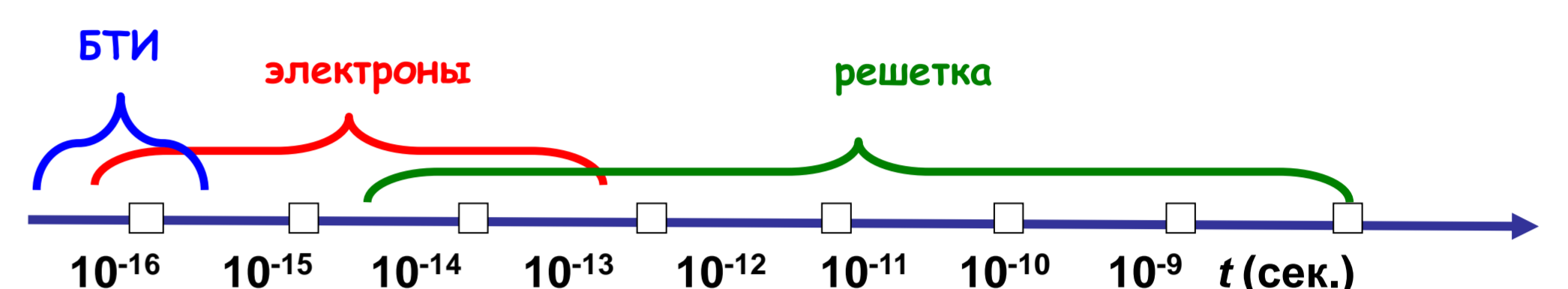


Схематичное изображение прохождения иона через решетку 6H-SiC



<https://doi.org/10.48550/arXiv.2209.10270>

Примеры сфер применения SiC

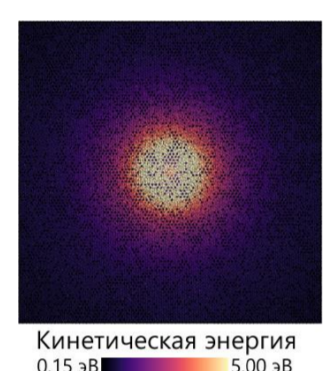


Шкала характерных масштабов протекания процессов в треке БТИ

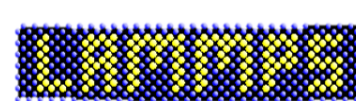
2. Модель

Монте-Карло код **TREKIS-3** [1].
Описание возбуждения электронов и передачи энергии в решетку.

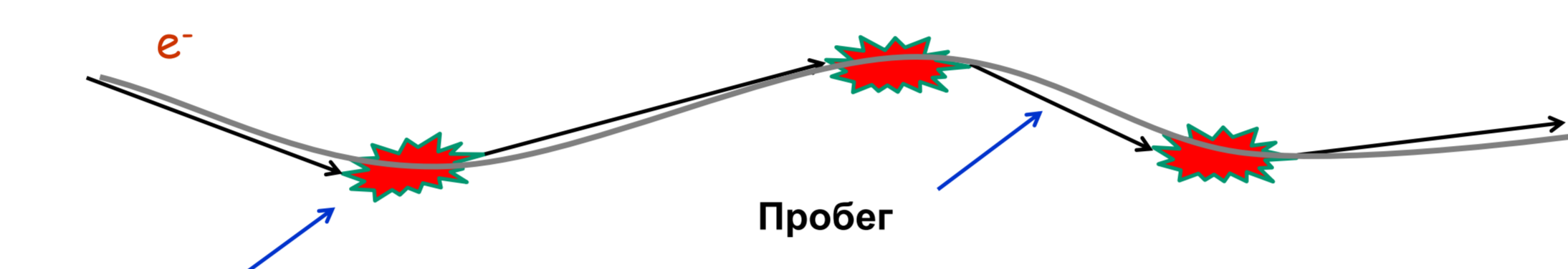
Создание начального поля скоростей для молекулярной динамики (МД) [2].



Пакет **LAMMPS** [3].
Моделирование эволюции возбужденной атомной подсистемы методами классической МД.



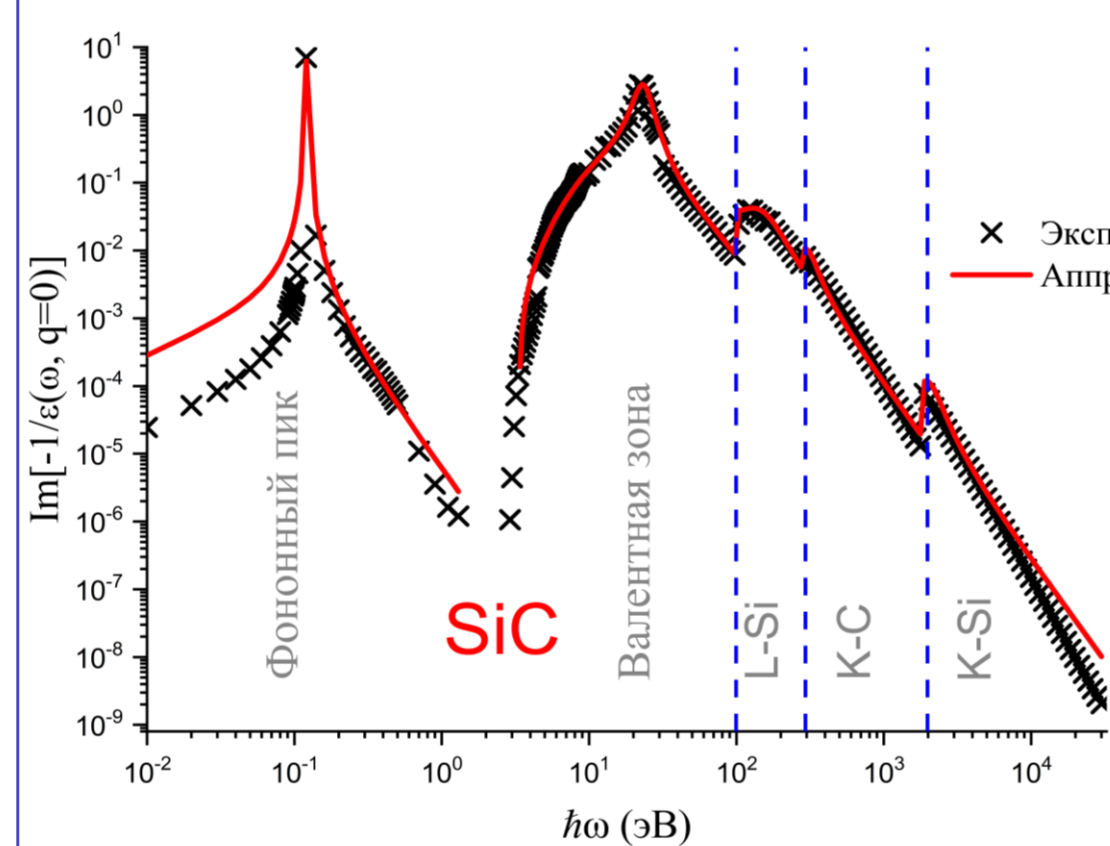
МК моделирование



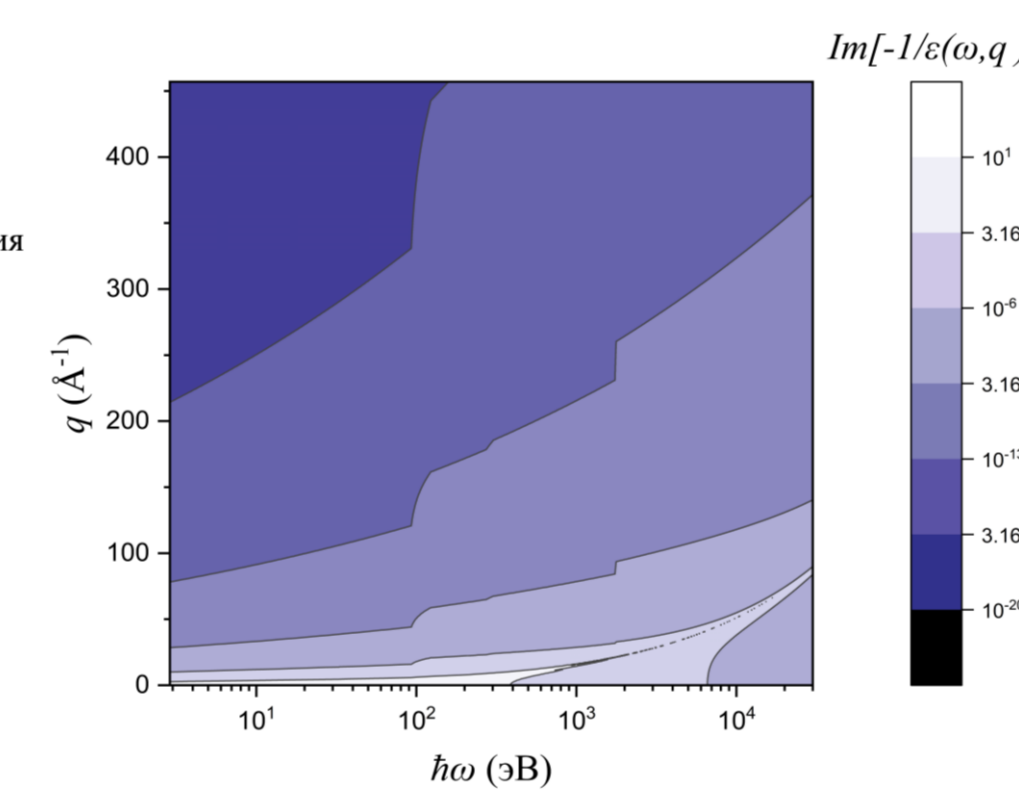
Дифференциальное сечение рассеяния на системе взаимодействующих частиц [4]:

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

Функция потерь Температурный фактор



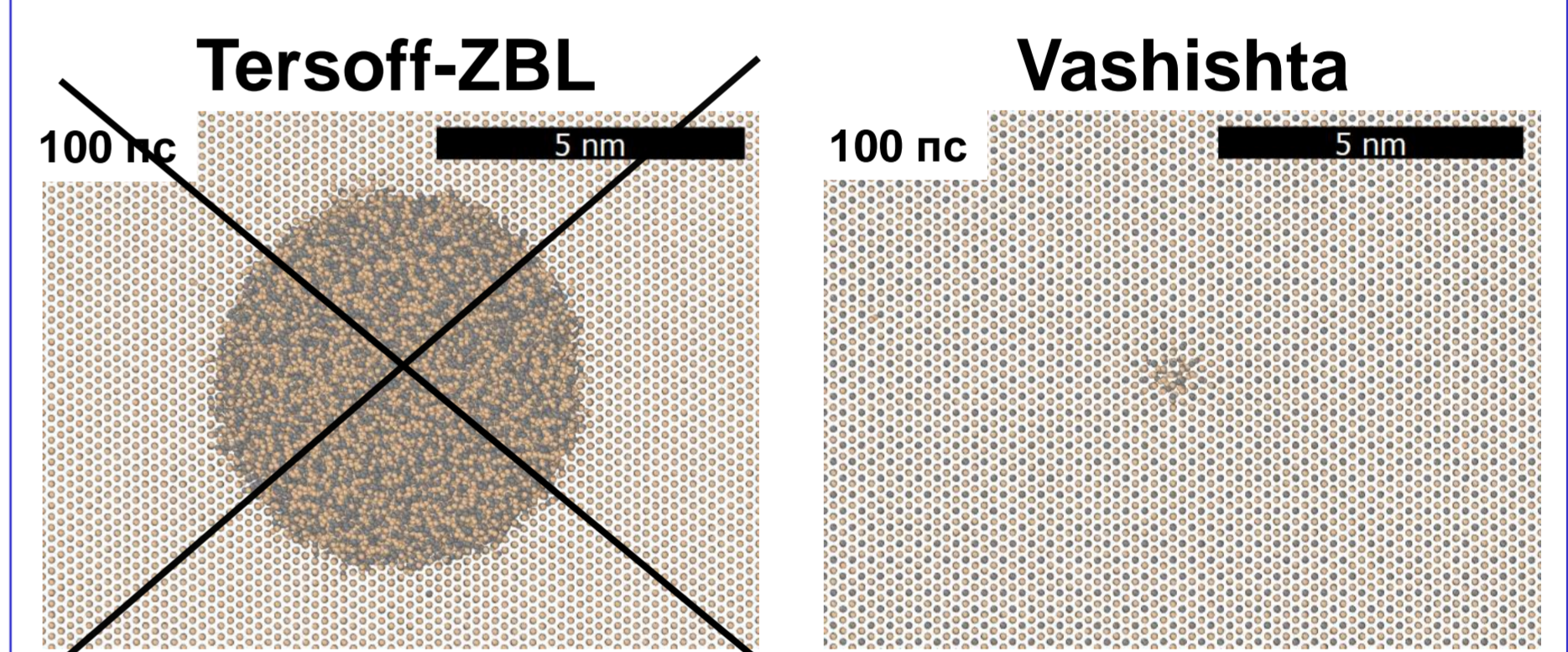
Функция потерь из оптических экспериментов



Импульсная зависимость функции потерь

МД моделирование

Bi 710 МэВ
При 300°K треков экспериментально не наблюдалось [5]!



В расчетах используется потенциал Vashishta [6]
Траектории частиц в МД находятся по алгоритму Верле:

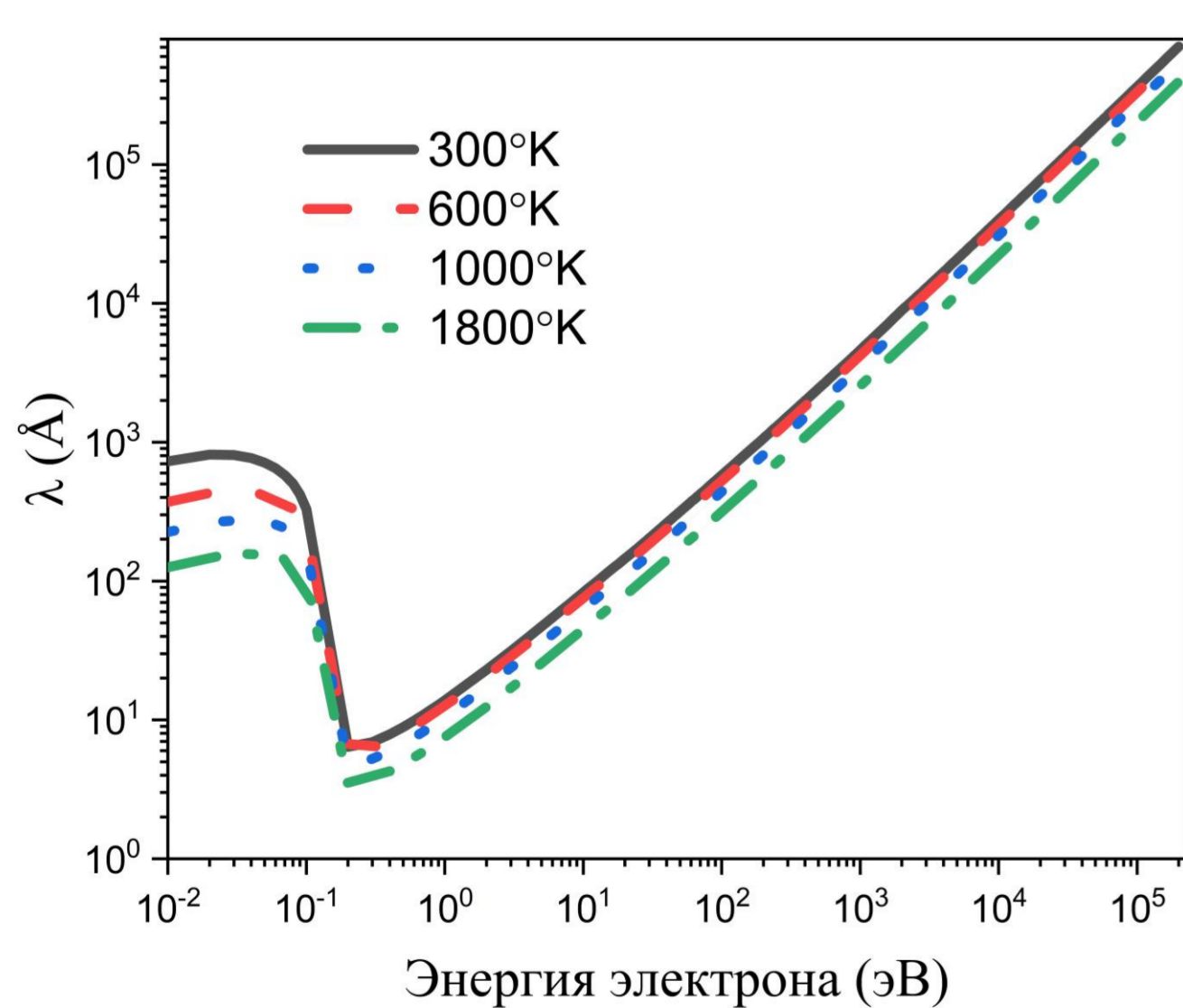
$$\vec{r}^i(t + \Delta t) = \vec{r}^i(t) + \vec{v}^i(t)\Delta t + \frac{\vec{f}^i(t)}{2m} \Delta t^2$$

$$\vec{v}^i(t + \Delta t) = \vec{v}^i(t) + \frac{\vec{f}^i(t + \Delta t) + \vec{f}^i(t)}{2m} \Delta t$$

$$\vec{f}^i(t) = \frac{\partial}{\partial \vec{r}^i} U(\{\vec{r}_i(t)\})$$

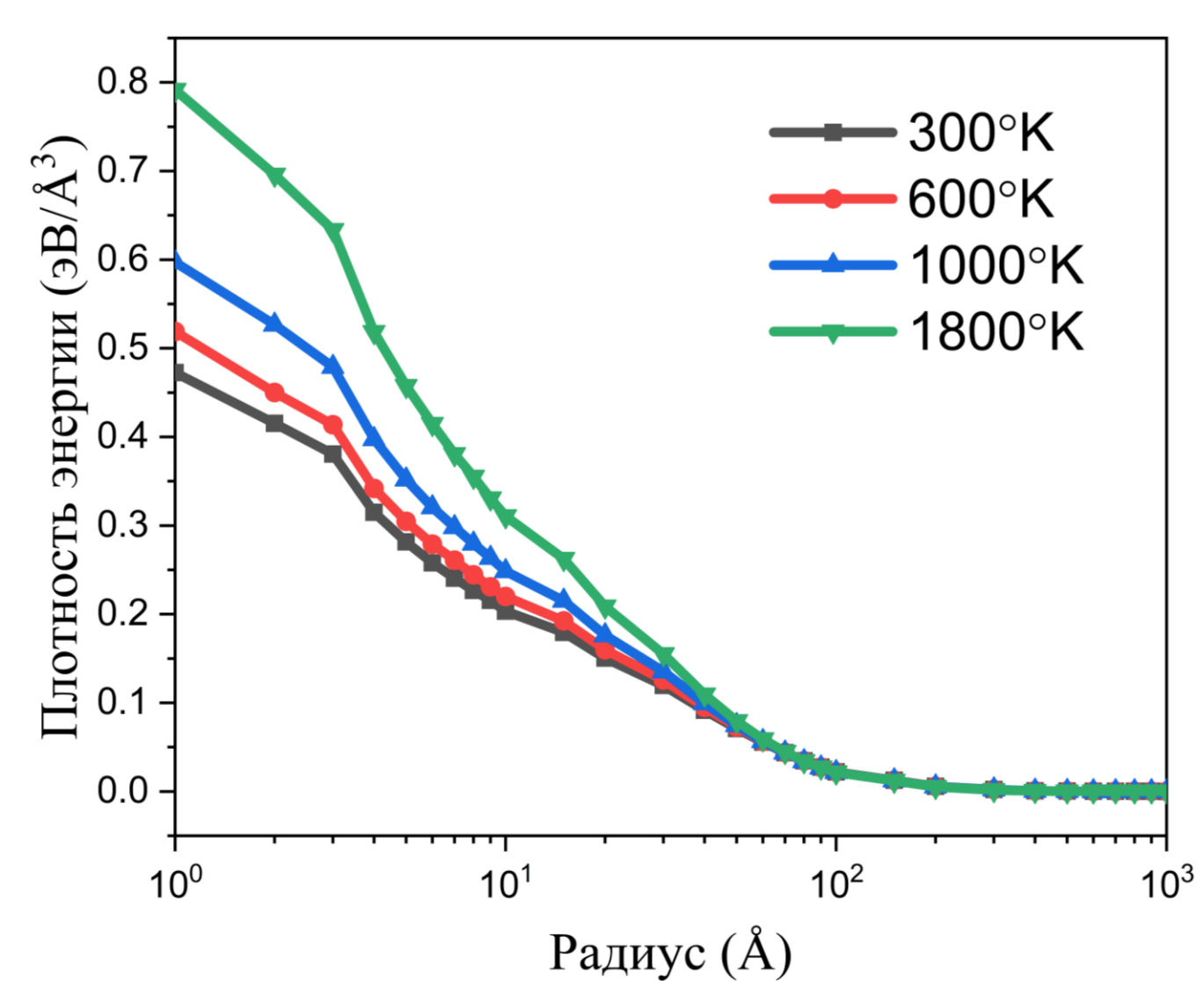
3. Результаты моделирования

Bi 710 МэВ (34 кэВ/нм)



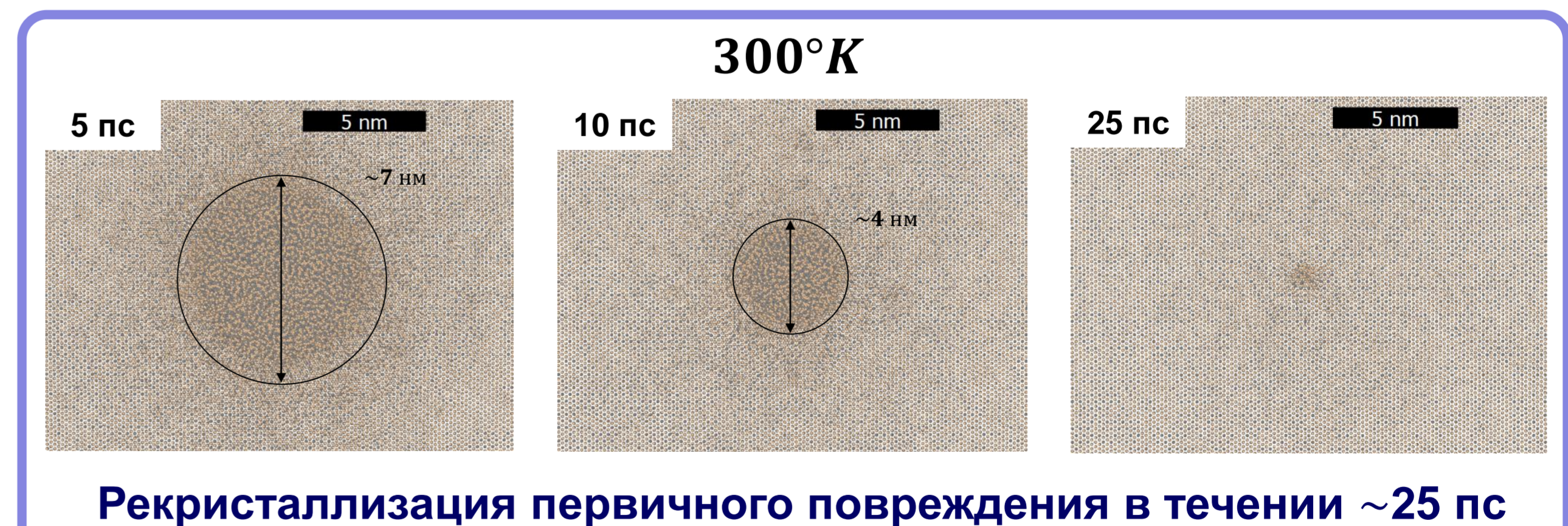
Длины пробега электронов до рассеяния на решетке

Сечение рассеяния растет с температурой решетки



Плотность энергии, переданной от электронного возбуждения в решетку

Плотность энергии также растет с температурой решетки



Вывод: Предсказано возникновение радиационных повреждений в SiC при высоких температурах облучения

[1] N.A. Medvedev, R.A. Rymzhanov, A.E. Volkov, J. Phys. D: Appl. Phys. 48 (2015).

[2] R.A. Rymzhanov, N. Medvedev, A.E. Volkov, J. Phys. D: Appl. Phys. 50 (2017) 475301.

[3] S. Plimpton, J. Comp. Phys. 117 (1995) 1-19.

[4] L. Van Hove, Phys. Rev. 95 (1954) 249-262.

[5] S.J. Zinkle, J.W. Jones, V.A. Skuratov, Mater. Res. Soc. Symp. - Proc. 650 (2001) 1-6.

[6] P. Vashishta, R.K. Kalia, A. Nakano, J.P. Rino, J. Appl. Phys. 101 (2007).