

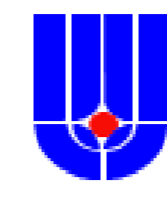
# Повреждение вдоль треков быстрых тяжелых ионов в полиэтилене

53-я Международная Тулиновская конференция по Физике Взаимодействия Заряженных Частиц с кристаллами, 2024

П.А. Бабаев<sup>\*1,2</sup>, Р.А. Воронков<sup>1,2</sup> и А.Е. Волков<sup>1,2</sup>



1) ФИАН им. П.Н. Лебедева



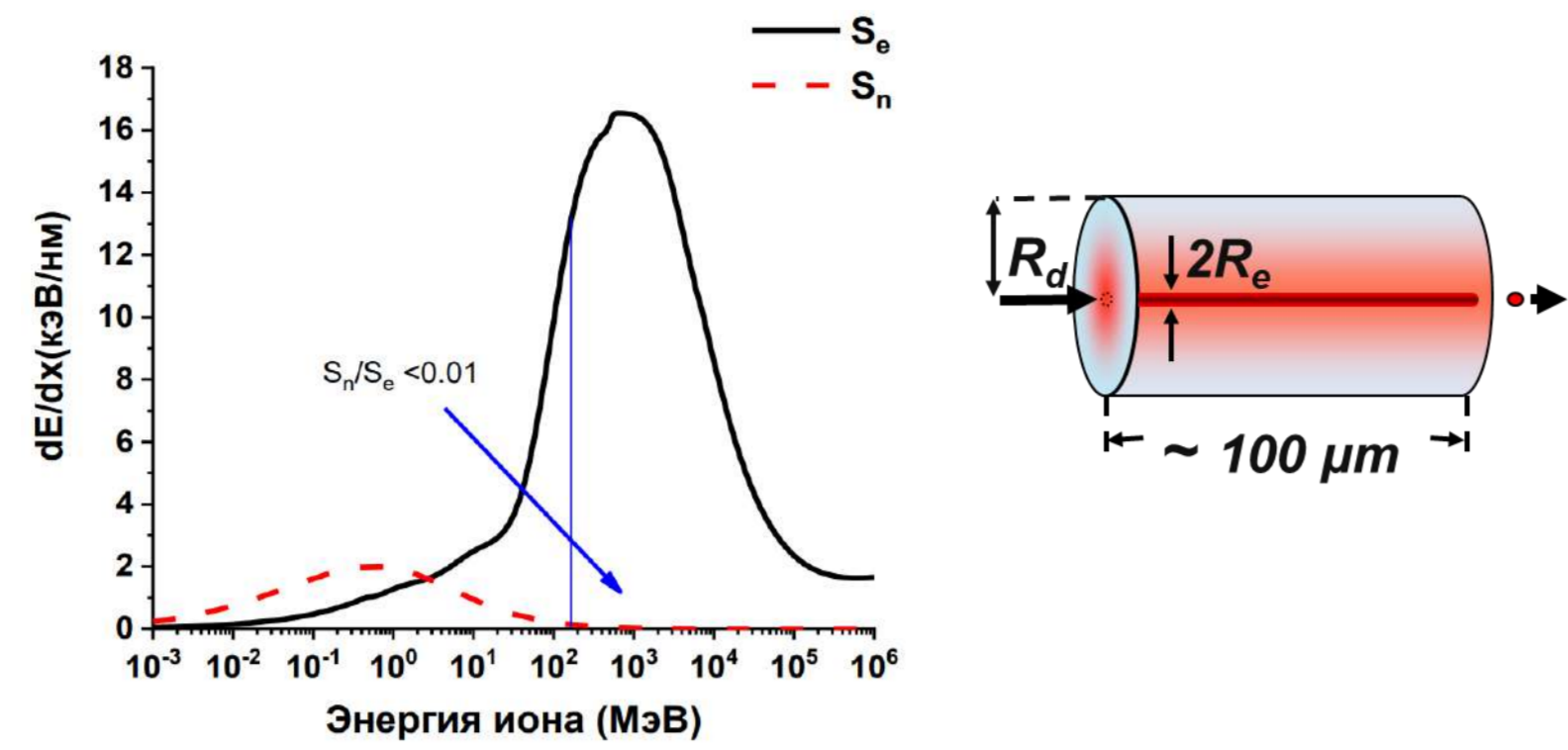
2) НИЦ «Курчатовский институт»

\* babaevpa@lebedev.ru

## 1. Быстрые тяжелые ионы (БТИ)

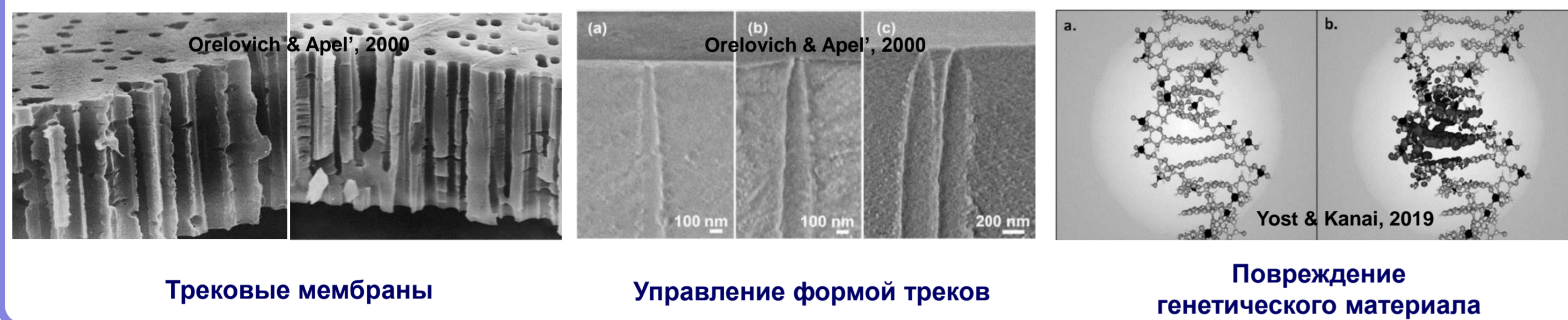
Торможение на электронной подсистеме

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



## 2. Облучение полимеров

высокая чувствительность к облучению

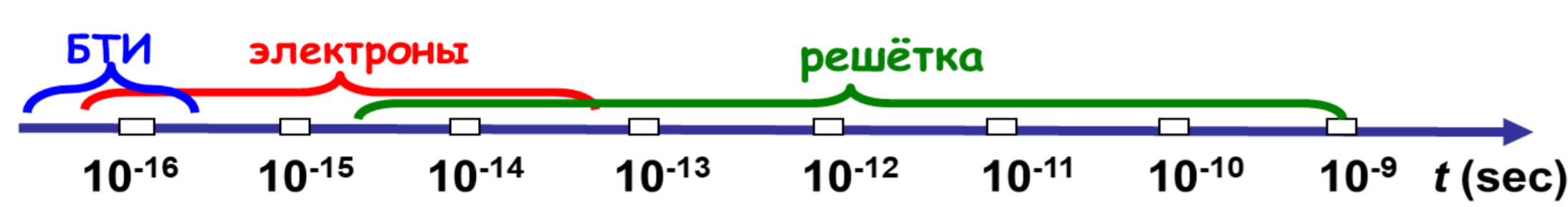


Трековые мембраны

Управление формой треков

Повреждение генетического материала

## 3. TREKIS + LAMMPS [1,2]

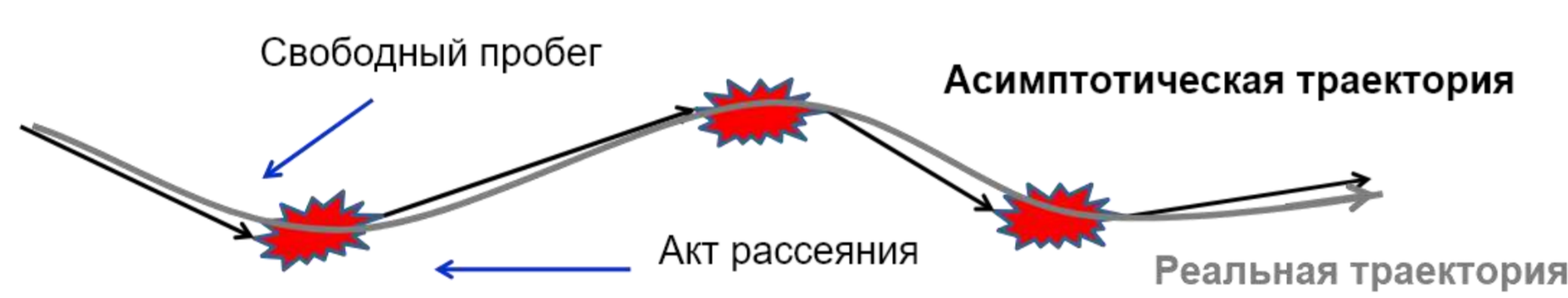


Разделение по времени — мультимасштабная модель

Монте-Карло код TREKIS

Пошаговое МК моделирование

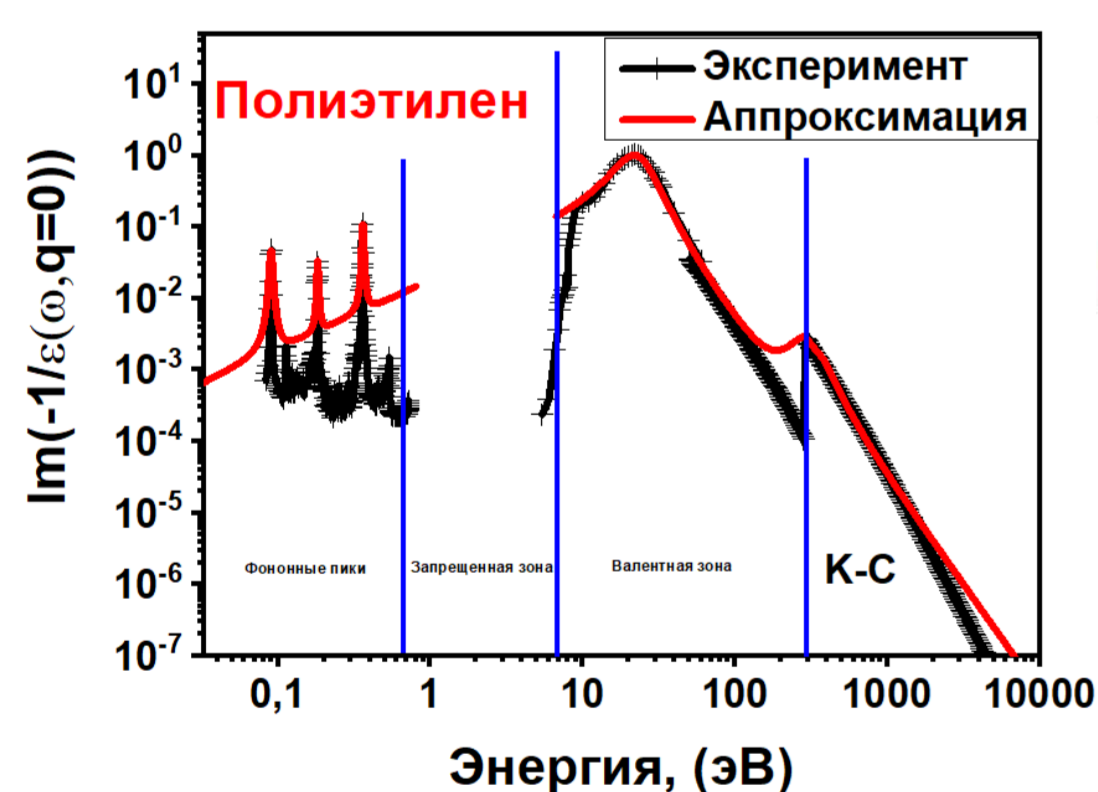
Марковская цепь: время акта рассеяния  $\ll$  времени свободного пробега



Первый порядок теории возмущений

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

Флуктуационно-диссипативная теорема  $S(\mathbf{k}, \omega) \sim \text{Im} \left( \frac{-1}{\varepsilon(\mathbf{k}, \omega)} \right)$



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

Отдельный атом      Температурный фактор      Функция энергетических потерь

Восстанавливается из эксперимента

МД LAMMPS

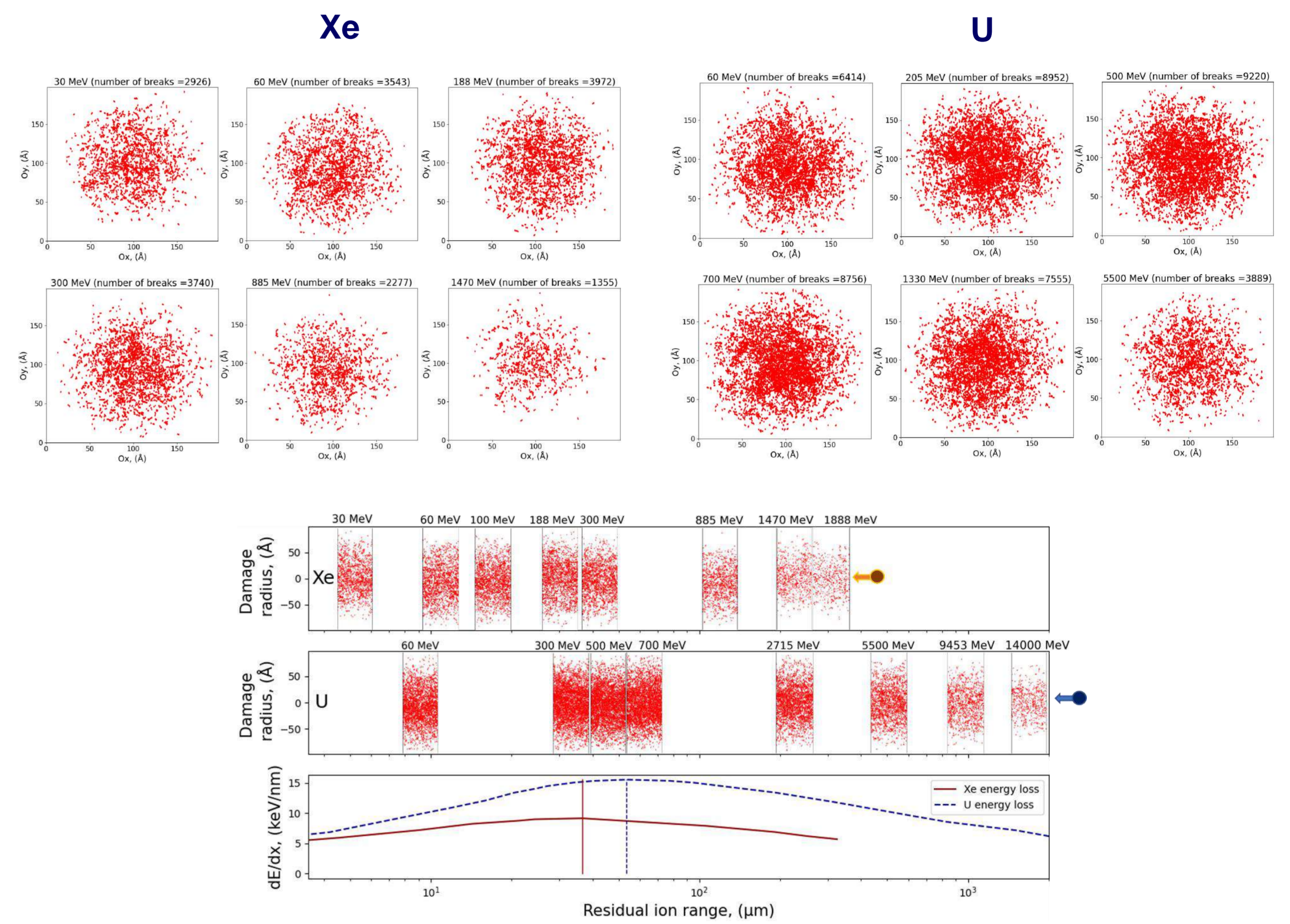
AIREBO-M

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

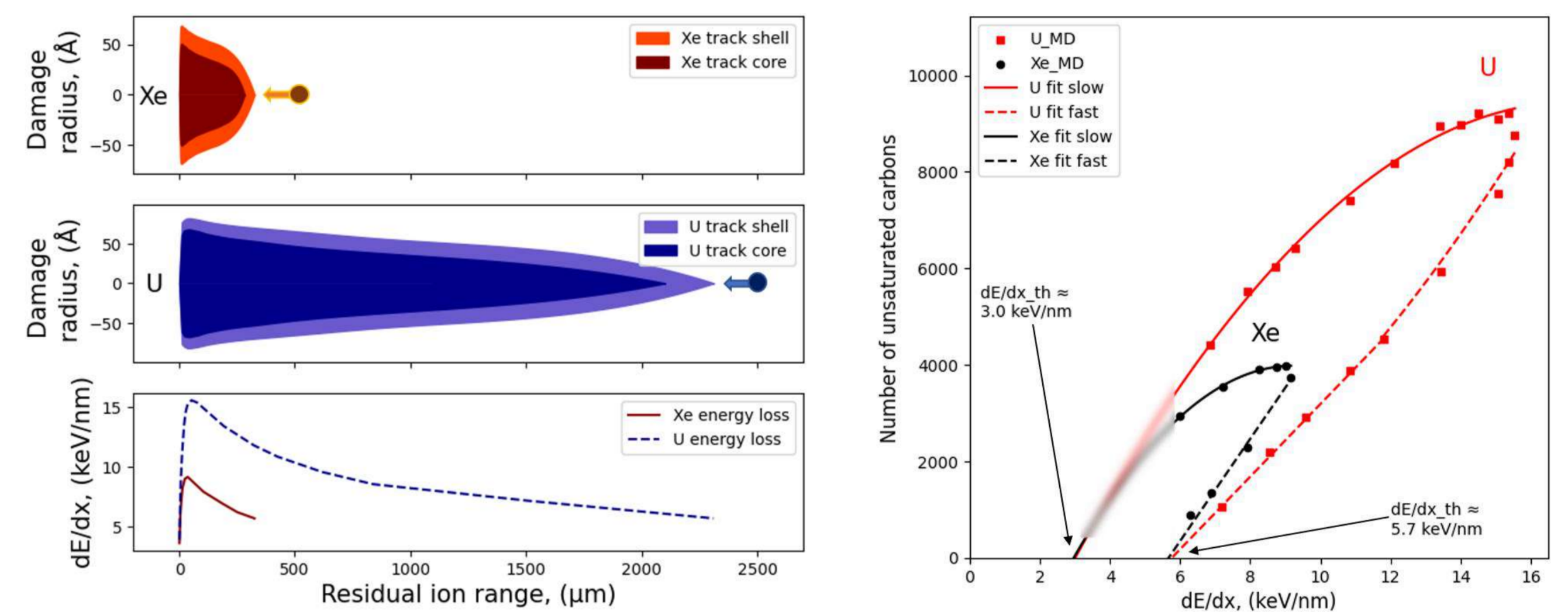
лучше учет сжатия ячейки

## 4. Треки в полиэтилене и эффект скорости

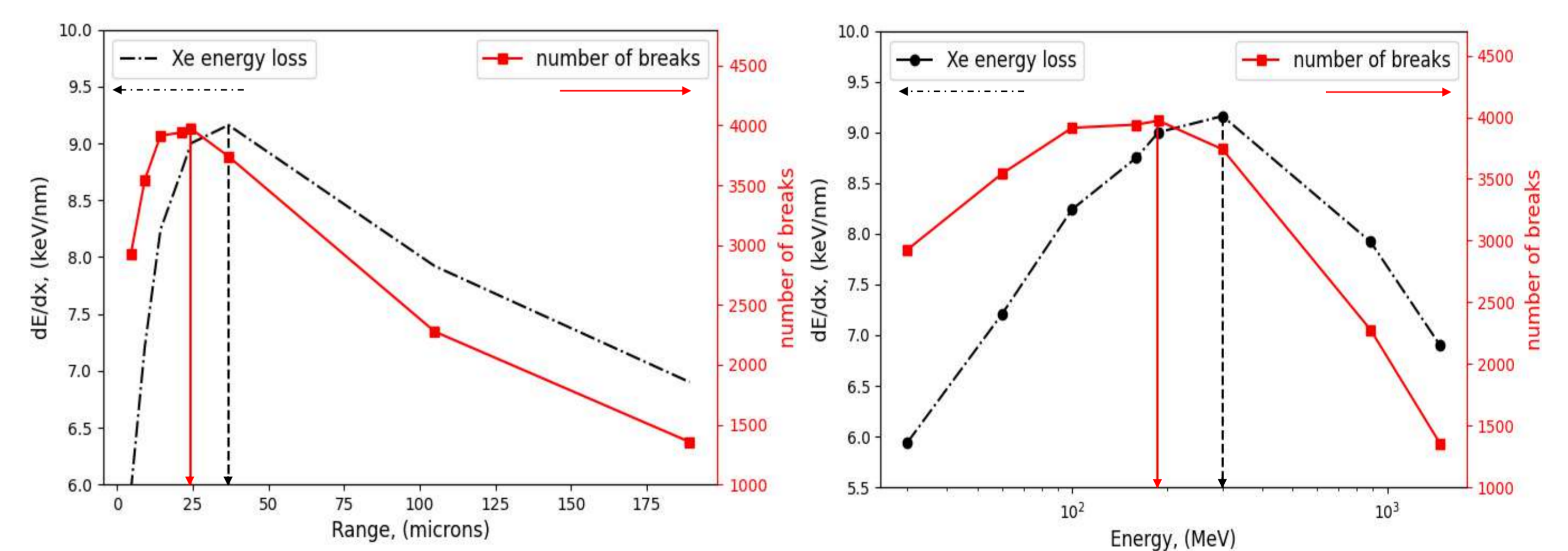
Сечение повреждения вдоль трека



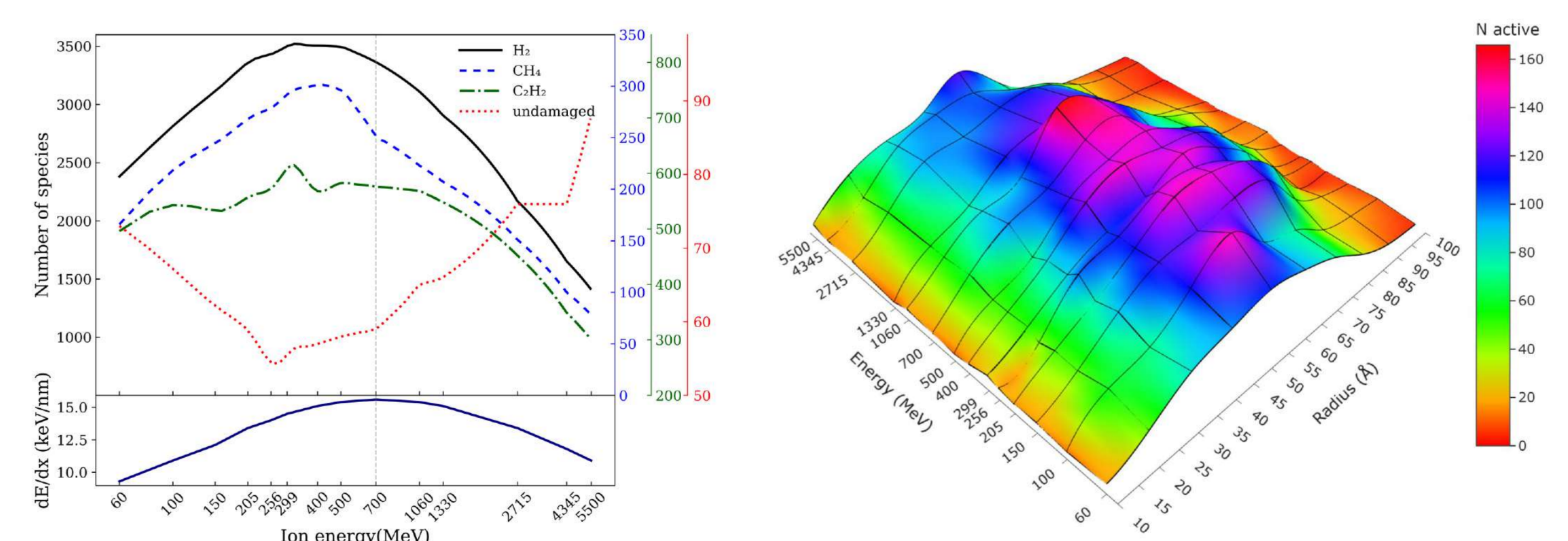
Структура трека и петлеобразная кривая повреждения



Максимум выделения энергии  $\neq$  максимум повреждения



Максимум выделения энергии  $\neq$  максимум повреждения



## 5. Результаты и выводы

- Восстановлена структура треков вдоль траекторий БТИ в полиэтилене
- Показана петлеобразная зависимость повреждения от потерь энергии; найдены пороги повреждения
- Положения максимумов потерь энергии, разорванных связей и химически активных фрагментов не совпадают

## 6. Литература

[1] Medvedev N. A., Rymzhanov R. A., Volkov A. E. // Journal of Physics D: Applied Physics. – 2015. – Т. 48. – №. 35. – С. 355303.  
 [2] Rymzhanov R. A. et al. // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res., Sect. B. – 2016. – Т. 388. – С. 41-52.  
 [3] Van Hove L. // Physical Review. – 1954. – Т. 95. – №. 1. – С. 249.  
 [4] S. Plimpton, Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics, J Comp Phys, 117, 1-19 (1995)  
 [5] O'connor T. C. et al // J. Chem. Phys. – 2015. – Т. 142. – №. 2.  
 [6] Medvedev N. et al. // Journal of Applied Physics. – 2023. – Т. 133. – №. 10.  
 [7] Babaev P. et al. // Journal of Materials Science. – 2023. – Т. 58. – №. 45. – С. 17275-17291.  
 [8] Rymzhanov R. A., Medvedev N., Volkov A. E. // Journal of Materials Science. – 2023. – Т. 58. – №. 35. – С. 14072-14079.