ПОВРЕЖДЕНИЕ ОРГСТЕКЛА БЫСТРЫМИ ТЯЖЕЛЫМИ ИОНАМИ: ТОНКАЯ ПЛЁНКА И ОБЪЁМНАЯ МИШЕНЬ

П.А. Бабаев1,\*), А.Е. Волков1,2)

1) ФИАН им П.Н, Лебедева, Москва, Россия

2) НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия

\*) e-mail: babaevpa@lebedev

Впервые на атомарном уровне разрешения проведено моделирование и визуализация повреждений в тонкой плёнке и объёмной мишени из полиметилметакрилата (ПММА) при облучении быстрыми тяжёлыми ионами (БТИ), тормозящимися в режиме электронных потерь энергии. Кинетика возбуждения электронной и атомной систем ПММА моделировалась с использованием кода TREKIS-3 [1]; реакция атомной системы на вносимое возбуждение описывалась в молекулярно-динамическом пакете LAMMPS [2]. Использовалось оптимизированное для быстрых расчётов реактивное межатомное силовое поле ReaxFF [3], позволяющее учитывать как разрывы, так и образование химических связей.

На примере облучения ионом Au 600 МэВ (область брегговского пика потерь энергии) установлено, что поперечные размеры повреждений существенно отличаются для тонкой плёнки и объёмного образца: ~21 нм и ~12-13 нм в диаметре, соответственно. В тонкой плёнке вследствие распыления материала с поверхности образуется отверстие, окружённое тонким ободом (кратер) толщиной 5 нм и переменной высотой 3–4 нм. В объёмном образце повреждённая область, несмотря на значительное разрушение химических связей в полимерных цепочках и снижение плотности материала, не демонстрирует образования пустот в ядре трека.

ЛИТЕРАТУРА

1. Medvedev N. et al. //Journal of Applied Physics. – 2023. – Т. 133. – №. 10.
2. Thompson A. P. et al. //Computer Physics Communications. – 2022. – Т. 271. – С. 108171.
3. Kanski M. et al. // The Journal of Physical Chemistry Letters. – 2022. – T.13. – №. 2.