МОДЕЛИРОВАНИЕ КОЛЛАПСА ЗАПРЕЩЕННОЙ ЗОНЫ ДИЭЛЕКТРИКОВ В ТРЕКАХ БЫСТРЫХ ТЯЖЕЛЫХ ИОНОВ

Р.А. Воронков1,\*), Д.И. Зайнутдинов1), Н.А. Медведев2,3), А.Е. Волков1,4)

1) Физический Институт Академии Наук, Москва, Россия

2) Институт Физики, Прага, Чехия

3) Институт Физики Плазмы, Прага, Чехия

4) Национальный Исследовательский Центр Курчатовский Институт, Москва, Россия

\*) e-mail: roman.a.voronkov@gmail.com

Облучение диэлектриков быстрыми тяжелыми ионами (БТИ) изначально приводит к экстремальному возбуждению электронной подсистемы мишени. При моделировании формирования конечных повреждений, помимо рассеяния возбужденных электронов на решетке, необходимо учитывать энергию, запасенную в валентных дырках мишени /1/. В оригинальной Монте-Карло модели TREKIS эта энергия передается за счет коллапса запрещенной зоны, вызываемого движением атомов в изменённом возбуждёнными электронами межатомном потенциале /2/. Однако, в деталях кинетика этого коллапса в условиях возбуждения атомной и электронной систем материала, соответствующего трекам БТИ, ранее не рассматривалась.

Мы использовали теорию функционала плотности в комбинации с начальными данными из TREKIS для описания процесса коллапса запрещенной зоны и сопутствующих ему эффектов в треках БТИ в диэлектриках.

ЛИТЕРАТУРА

1. R. A. Rymzhanov, N. A. Medvedev, and A. E. Volkov, // Nucl. Instruments Methods Phys. Res. B, 2015, 365, 462.

2. N. Medvedev, F. Akhmetov, R. A. Rymzhanov, R. Voronkov, and A. E. Volkov, // Adv. Theory Simulations, 2022, 5, 2200091