

ОБЪЕДИНЕННЫЙ ИНСТИТУТ ЯДЕРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ

17-2017-71  
На правах рукописи

РЫМЖАНОВ

Руслан Аликович

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ВОЗБУЖДЕНИЯ  
И РЕЛАКСАЦИИ ЭЛЕКТРОННОЙ ПОДСИСТЕМЫ  
МОНОКРИСТАЛЛОВ ОКСИДОВ,  
ОБЛУЧАЕМЫХ БЫСТРЫМИ ТЯЖЕЛЫМИ ИОНАМИ

Специальность: 01.04.07 — физика конденсированного состояния

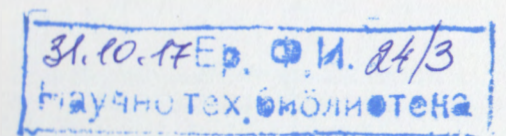
АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени  
кандидата физико-математических наук

Отпечатано методом прямого репродуцирования  
с оригинала, предоставленного автором.

Подписано в печать 12.10.2017.  
Формат 60×90/16. Бумага офсетная. Печать офсетная.  
Усл. печ. л. 1,56. Уч.-изд. л. 1,5. Тираж 100 экз. Заказ № 59249.

Издательский отдел Объединенного института ядерных исследований  
141980, г. Дубна, Московская обл., ул. Жолио-Кюри, 6.  
E-mail: [publish@jinr.ru](mailto:publish@jinr.ru)  
[www.jinr.ru/publish/](http://www.jinr.ru/publish/)



Дубна 2017

Работа выполнена в Лаборатории ядерных реакций имени Г.Н.Флерова  
Объединенного института ядерных исследований, г. Дубна.

Научный руководитель:

**Скуратов Владимир Алексеевич,**  
доктор физико-математических наук,  
начальник сектора ЛЯР ОИЯИ

Официальные оппоненты:

**Бородин Владимир Алексеевич,**  
доктор физико-математических наук,  
ведущий научный сотрудник НИЦ  
«Курчатовский институт», г. Москва

**Стариков Сергей Валерьевич,**  
кандидат физико-математических наук,  
старший научный сотрудник,  
ФГБУ науки Объединенный институт  
высоких температур РАН

Ведущая организация:

ФГБУ «Институт теоретической и  
экспериментальной физики  
имени А.И. Алиханова Национального  
исследовательского центра «Курчатовский  
институт»

Защита состоится 26 » декабря 2017 г. в 15.00 часов на  
заседании диссертационного совета Д720.001.06 при Лаборатории  
ядерных реакций имени Г.Н.Флерова и Лаборатории нейтронной физики  
имени И.М.Франка Объединенного института ядерных исследований,  
г. Дубна Московской области.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ОИЯИ и на странице  
[http://www.info.jinr.ru/announce\\_disser.htm](http://www.info.jinr.ru/announce_disser.htm).

Автореферат разослан 17 » октября 2017 г.

Ученый секретарь  
диссертационного совета

кандидат физико-математических наук

  
Попеко А.Г.

## Общая характеристика работы

### Актуальность темы исследования

Исследование свойств материалов при облучении быстрыми тяжелыми ионами (БТИ,  $(dE/dx) \sim 10-50$  кэВ/нм, где  $dE/dx$  - линейные потери энергии иона (ЛПЭ)) представляет значительный интерес для изучения радиационной стойкости материалов ядерной энергетики и космической электроники. БТИ большую часть своей энергии при прохождении через вещество теряют на возбуждение электронной подсистемы кристалла. Последующая релаксация этого возбуждения и передача избыточной энергии в решетку материала может приводить к формированию наноразмерных структурно-фазовых изменений в окрестности траектории иона ( $\sim 10$  нм, трек БТИ) [1]. Подобные изменения структуры материала могут существенно влиять на физические, химические и механические свойства облучаемых материалов, в том числе на их радиационную стойкость.

Материалы оболочек топливных элементов ядерного реактора в процессе эксплуатации контактируют с ядерным топливом, и их поверхностный слой ( $\sim 15$  мкм) постоянно подвергается облучению осколками деления ( $M \sim 50-100$  а.е.м,  $E \sim 100$  МэВ). Возникающие при этом радиационные повреждения могут ухудшить механические свойства и радиационную стойкость интерфейсного слоя материал-топливо, что может сказаться на безопасности реактора и требует всестороннего исследования воздействия БТИ на эти материалы с применением как экспериментальных, так и теоретических методик.

Ускоренные пучки тяжелых ионов высоких энергий служат инструментом моделирования и исследования эффектов воздействия на материалы осколков деления и высокоэнергетических частиц в составе космического излучения.

Также облучение быстрыми тяжелыми ионами может использоваться в качестве эффективного средства наноразмерной модификации материалов. Методики, основанные на использовании БТИ-облучения, уже эффективно применяются в технологиях получения трековых мембран, проводящих каналов, наноструктурирования поверхности, модификации наноструктур.

При исследовании свойств материалов, облучаемых БТИ, обычно выделяют два характерных режима: индивидуальных и перекрывающихся треков. Индивидуальные треки формируются при малых дозах облучения ( $\varphi < 10^{10} - 10^{11} \text{ см}^{-2}$ ), когда поврежденные в результате пролёта иона области не перекрываются. Такой режим позволяет изучать эффекты образования треков в материалах. Этот режим также представляет интерес для исследования наномодификации материалов и воздействия космических лучей на электронику.

Режимы облучения с большими флюенсами ( $\varphi > 10^{12} \text{ см}^{-2}$ ) обеспечивают перекрытие трековых областей от разных ионов и их взаимодействие между собой. Этот режим имеет принципиальную важность для исследования свойств материалов ядерной энергетики, контактирующих с ядерным топливом, так как они могут облучаться осколками деления до очень высоких флюенсов ( $\sim 10^{16} \text{ см}^{-2}$ ).

В настоящее время исследованию эффектов БТИ в различных материалах посвящено большое число как экспериментальных, так и теоретических работ. Однако, несмотря на все многообразие литературных данных, используемые в настоящее время модели возбуждения трековой области и структурных изменений в ней не учитывают всех особенностей процессов, протекающих при возбуждении материала быстрым тяжелым ионом, описывая только отдельные этапы формирования треков. До сих пор не существует модели, которая бы описывала кинетику возбуждения и релаксации в треках БТИ без использования подгоночных параметров и калибровочных экспериментов.

Поэтому крайне важным представляется построение количественных моделей, которые, основываясь на наиболее общих фундаментальных подходах и используя современные численные методы, обеспечивали бы количественную реализацию применяемых фундаментальных методов. Подобные модели позволят в едином подходе моделировать кинетику возбуждения материала (электронной и ионной подсистемы) в треке БТИ, последующую релаксацию этого возбуждения и кинетику структурных изменений, стимулированных этой релаксацией.

## **Цели и задачи работы**

Цели и задачи настоящей работы можно сформулировать следующим образом:

1. Построение микроскопической количественной Монте-Карло (МК) модели возбуждения электронной и ионной подсистем диэлектриков в наноразмерных треках БТИ.
2. Применение разработанной модели для определения пространственно-временных параметров возбуждения электронной и ионной подсистем кристалла оксида алюминия, облучаемого различными ионами.
3. Моделирование возникновения структурно-фазовых изменений в  $\text{Al}_2\text{O}_3$  оксиде алюминия в результате релаксации возбуждения решетки в треке БТИ и сопоставление этих результатов с результатами исследований облученных образцов методами просвечивающей электронной микроскопии.

## **Результаты работы, выносимые на защиту**

1. Модель, описывающая возбуждение и релаксацию электронной подсистемы в треке БТИ и учитывающая коллективную реакцию этих подсистем на вносимое возбуждение в рамках формализма динамического структурного фактора и комплексной диэлектрической функции (ДСФ - КДФ).
2. Результаты расчетов пространственно-временных параметров, характеризующих возбуждение электронной и ионной подсистем  $\text{Al}_2\text{O}_3$  в треке БТИ: радиальные и временные зависимости плотности электронов и валентных дырок и их энергии, а также плотности энергии в решетке материала.
3. Результаты моделирования методами молекулярной динамики кинетики структурных изменений в треке БТИ. Основные параметры, характеризующие поврежденную область: радиальные распределения смещений атомов, плотность вещества после релаксации трека, остаточные напряжения. Результаты моделирования эффектов, возникающих при перекрытии трековых областей.

### **Научная новизна работы**

В ходе выполнения диссертационной работы были впервые рассмотрены и решены следующие задачи:

1. Разработана количественная, основанная на формализме КДФ-ДСФ Монте-Карло модель, описывающая кинетику возбуждения и релаксации электронной подсистемы материалов с учетом эффектов пространственно-временных корреляций в системе рассеивателей (электронов мишени).
2. Описана кинетика возбуждения электронной подсистемы диэлектриков в треке тяжелого иона и получены количественные пространственно-временные параметры этого возбуждения.
3. При описании кинетики возбужденного материала в треке БТИ было учтено пространственное перераспределение валентных дырок, а также их взаимодействие с ионной и электронной подсистемами мишени.
4. Проведено моделирование изменение структуры оксида алюминия в треках высокоэнергетических тяжелых ионов. Впервые продемонстрирован эффект восстановления структуры дефектных областей при перекрытии треков БТИ в  $Al_2O_3$ . На основе этого эффекта было объяснено насыщение плотности треков с увеличением дозы облучения, наблюдаемое на эксперименте.

### **Достоверность**

Применимость разработанной модели для описания возбуждения электронной и ионной подсистем в треках высокоэнергетических тяжелых ионов обосновывается тем, что:

1. Модель основана на общих фундаментальных принципах, не использует свободные подгоночные параметры, а также базируется на минимальном количестве упрощающих приближений.
2. Используемые сечения взаимодействия электронов с электронной подсистемой материала хорошо согласуются с данными других авторов, собранными в базе данных NIST [2], а рассчитанные потери энергии ионов на электронное торможение хорошо согласуются с принятыми в сообществе программы SRIM [3] и CasP [4].

3. Полученные в результате моделирования параметры поврежденной трековой области (размеры, плотность материала, относительная деформация решетки) находятся в хорошем согласии с экспериментальными данными [5].

### **Теоретическая и практическая значимость работы**

1. Разработана модель, описывающая экстремальное возбуждение электронной и ионной подсистем материала и учитывающая их коллективную реакцию на внешнее возмущение на ультракоротких пространственных и временных масштабах. Параметры возбужденного состояния электронной и ионной подсистем материала, получаемые в результате применения данной модели, могут быть использованы для построения новых моделей, описывающих наноразмерные структурно-фазовые превращения в треках БТИ.
2. Разработанная модель и полученные в диссертации результаты могут использоваться при решении задач, связанных с моделированием радиационных эффектов, вызываемых прохождением тормозящихся в режиме электронных потерь энергии осколков деления и космических лучей в диэлектрических материалах ядерной энергетики и космической отрасли, а также при разработке технологий наноразмерной модификации материалов пучками БТИ.

### **Методология и методы исследования**

В диссертационной работе были использованы современные аналитические методы статистической и квантовой механики, радиационной физики, теории конденсированного состояния и теории дефектов, а также подходы, разработанные для решения задач ионизационной кинетики и взаимодействия лазерного излучения с веществом.

Общим моментом применения этих методов является их необходимая модификация, связанная с крайне малыми временными и пространственными масштабами процессов, протекающих в треках БТИ. Подобная модификация физических методов носит пионерский характер и представляет значительный интерес для описания кинетики

быстропротекающих (пикосекунды) процессов релаксации неравновесных состояний вещества в пространственно-ограниченной (нанометры) области.

В расчетах применяются современные численные алгоритмы (Монте-Карло, асимптотических траекторий), которые широко используются в радиационной физике твердого тела.

### **Апробация работы**

Материалы, представленные в диссертации, были доложены на следующих конференциях:

1. 17-я Международная Конференция по Радиационным эффектам в диэлектриках (REI-17), (Хельсинки, Финляндия, 30 июня – 5 июля 2013 г.);
2. Международная конференция молодых ученых и специалистов ОМУС-2014, (Дубна, Россия, 24 - 28 февраля 2014 г.);
3. Конференция европейского общества по исследованию материалов (E-MRS Spring Meeting 2014), (Лилль, Франция, 26-30 мая 2014 г.);
4. Международная конференция по радиационным эффектам в диэлектриках и неметаллических материалах (REINM-2015), (Астана, Казахстан, 2 - 5 июня 2014 г.);
5. Конференция европейского общества по исследованию материалов (E-MRS Spring Meeting 2015), (Лилль, Франция, 11-15 мая 2015 г.);
6. Международная конференция по быстрым тяжелым ионам в материалах (SHIM-2015), (Дармштадт, Германия, 18-21 мая 2015 г.);
7. IV ежегодная конференция молодых ученых и специалистов «Алушта-2015», (Алушта, Россия, 6-13 июня 2015 г.);
8. 4-ый симпозиум сотрудничества ОИЯИ и Южно-Африканской республики (4th JINR-South Africa symposium), (Дубна, Россия, 21-25 сентября 2015 г.);
9. XI Международная конференция взаимодействие излучения с твердым телом (ВИТТ-2015), (Минск, Беларусь, 23-25 сентября 2015г.)

Результаты диссертации также обсуждались на научных семинарах Сектора №8 и Центра прикладной физики Лаборатории ядерных реакций имени Г.Н. Флерова.

### **Личный вклад автора**

1. Построена Монте-Карло модель, количественно описывающая кинетику возбуждения и релаксации электронной подсистемы материалов. На основании формализма КДФ-ДСФ модель учитывает пространственно-временные корреляции во взаимодействующей системе рассеивателей. Модель протестирована по результатам экспериментов по облучению различных материалов пучками БТИ.
2. С использованием этой модели описано возбуждение электронной и ионной подсистем оксида алюминия в треках БТИ и получены количественные параметры этого возбуждения.
3. Проведено моделирование кинетики структурных изменений  $Al_2O_3$  в треках БТИ методами молекулярной динамики. Получены размеры треков, пространственные распределения остаточных напряжений и плотности материала в трековой области. Продемонстрирован эффект восстановления исходной структуры в существующих дефектных трековых областях в результате близкого пролёта БТИ.

Все результаты работы, представленные в главах 2 и 3, получены автором лично или при его непосредственном участии.

### **Публикации автора**

Диссертационная работа включает в себя исследования, выполненные в период с 2012 по 2016 годы в Лаборатории ядерных реакций имени Г.Н. Флерова ОИЯИ. Результаты диссертации изложены в 12 публикациях, относящихся к категории статей в научных журналах и докладов в сборниках материалов конференций, 11 из которых внесены в список рецензируемых журналов, индексируемых в системах Web of Science и SCOPUS, и рекомендованных ВАК Минобрнауки РФ. Список публикаций автора приводится в конце автореферата.

### **Структура и объем работы**

Работа состоит из введения, трех глав, заключения и списка цитируемой литературы. Работа содержит 109 страниц, включает 33 рисунка, 2 таблицы. Список цитированной литературы содержит 163 наименования.

## Основное содержание работы

Во **введении** приведен первичный анализ современного состояния исследований в области эффектов облучения материалов БТИ, обоснована актуальность и сформулирована цель диссертационной работы. Указана практическая и фундаментальная важность полученных результатов, а также их научная новизна.

В **первой главе** (*Современные модели, описывающие взаимодействие быстрых тяжелых ионов с веществом*) приведен обзор и анализ численных и аналитических моделей, использующихся в настоящее время для изучения воздействия тяжелых заряженных частиц высокой энергии на свойства материалов. Рассмотрены преимущества и недостатки этих моделей и проведен анализ применимости приближений, используемых в описанных подходах. Показана актуальность фундаментальных и экспериментальных исследований, направленных на изучение процессов и механизмов, лежащих в основе формирования треков БТИ. На основании этого анализа сделаны следующие выводы:

1. Использование макроскопических подходов может привести к неверным результатам при описании наноразмерной и субпикосекундной кинетики процессов, происходящих при возбуждении материала быстрыми тяжелыми ионами.
2. Используемые в настоящее время модели возбуждения трековой области и структурных изменений в ней не учитывают всех особенностей процессов, протекающих при возбуждении материала БТИ, описывая только отдельные этапы формирования треков.
3. Принимая во внимание недостатки существующих моделей образования треков, сделан вывод, что наиболее целесообразным подходом представляется описание возбуждения материала в треке БТИ при помощи фундаментально обоснованной и проверенной в экспериментах количественной микроскопической модели.

В главе определены основные проблемы, а также обоснована мотивация выбора методов исследования, целей и задач диссертации. В конце главы на основании проведенного анализа формулируется постановка задач, решаемых в работе.

Во **второй главе** (*Монте-Карло моделирование электронной кинетики в треке БТИ в  $Al_2O_3$* ) приводится описание разработанной

Монте-Карло (МК) модели TREKIS [6] возбуждения электронной подсистемы материала, а также результаты моделирования электронной кинетики в нанометрической окрестности траектории БТИ в  $Al_2O_3$ .

В рамках первого борновского приближения [7] (первый порядок теории возмущений) сечение  $\sigma$  рассеяния частицы на системе связанных частиц факторизуется в виде произведения сечения взаимодействия со свободным рассеивателем и динамического структурного фактора (ДСФ), учитывающего пространственно-временные корреляции в системе рассеивателей (электронной подсистемы мишени) [8]. Для электронной подсистемы материала ДСФ связывается с комплексной диэлектрической функцией  $\varepsilon(\mathbf{q}, \omega)$  материала (КДФ) при помощи флуктуационно-диссипативной теоремы. В этом случае дифференциальное сечение рассеяния заряженной частицы на системе связанных рассеивателей имеет следующий вид:

$$\frac{d^2\sigma}{d(\hbar\omega)d(\hbar q)} = \frac{2[Z_e(v, q)e]^2}{\pi\hbar^2 v^2} \frac{1}{\hbar q} \operatorname{Im} \left[ \frac{-1}{\varepsilon(\omega, q)} \right] \quad (1)$$

где  $\hbar\omega$  – переданная налетающей частицей энергия,  $Z_e(v, q)$  – эффективный заряд иона в среде как функция его скорости  $v$  и переданного импульса  $q$ . Равновесный эффективный заряд тяжелого иона в среде в рамках разработанной модели определялся по формуле Баркаса [9].

Функцию  $\operatorname{Im} \left[ \frac{-1}{\varepsilon(\mathbf{q}, \omega)} \right]$  называют функцией энергетических потерь

(ФЭП, в англоязычной литературе – *loss function*). Эта функция может автоматически содержать в себе особенности, присущие твердому телу, например, коллективные моды в ансамбле электронов (образование плазмонов) и в решётке (фононы).

В настоящей работе для определения ФЭП был использован метод, основанный на её восстановлении из экспериментальных данных по фотопоглощению в виде суммы осцилляторных функций. Для проверки построенной диэлектрической функции рассчитанные с использованием формулы (1) длины пробегов электронов  $\lambda$  ( $\lambda = 1/n\sigma$ ,  $n$  – плотность рассеивателей) сравнивались с [2]. Сравнение показало хорошее согласие результатов используемого подхода с этими данными.

На Рис. 1 представлены рассчитанные ионизационные потери иона Хе ( $Z=54$ ) в зависимости от энергии налетающей частицы. На графике приводится сравнение с кодом SRIM [3] и CasP [4], из которого видно, что все три модели достаточно хорошо согласуются между собой (различие в предсказанных высотах брегговского пика менее 10%).

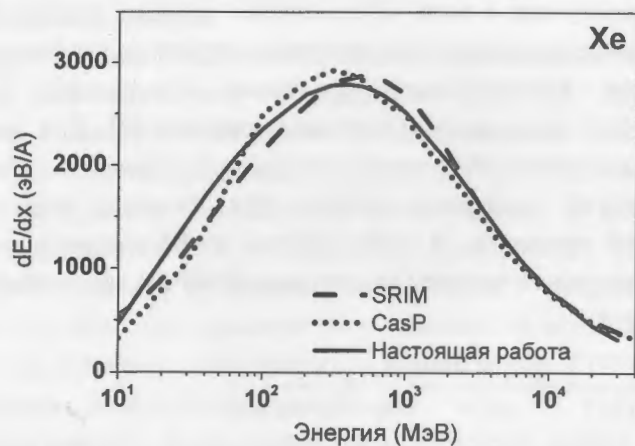


Рис. 1 Потери энергии на ионизацию ионов Хе в  $Al_2O_3$  в сравнении с результатами расчетов программ SRIM [3] и CasP [4]

Построенная и проверенная диэлектрическая функция оксида алюминия использовалась для расчета дифференциальных сечений взаимодействия заряженной частицы с электронной подсистемой этого материала [7] согласно выражению (1). Полученные сечения были затем использованы в Монте-Карло модели TREKIS [6] для описания кинетики электронной подсистемы в треке быстрого тяжелого иона. Эта оригинальная Монте-Карло модель основана на методе асимптотических траекторий и описывает: (а) первичный пролет БТИ и ионизацию атомов мишени; (б) последующий разлет первичных электронов, их упругое и неупругое взаимодействие с атомами среды, а так же кинетику всех вторичных поколений электронов, образующихся в треке; (в) релаксацию дырок глубоких атомных оболочек, созданных ионизацией БТИ или электронами, включая межатомные Оже-процессы и радиационные распады; (г) пространственное перераспределение валентных дырок и их упругое и неупругое взаимодействие со средой.

На Рис. 2 показаны полученные в результате применения модели радиальные распределения электронов и их энергии в треке ионов ксенона в  $Al_2O_3$  в различные моменты времени. На графиках, представляющих радиальные распределения энергии (Рис. 2б), видно распространение двух фронтов. Первый фронт – это баллистическое распространение возбужденных электронов по невозмущенному материалу. Возникновение второго фронта обусловлено появлением большого количества электронов выделенной энергии при возбуждении и распаде плазмонов в валентной зоне (максимум сечения взаимодействия приходится на переданную энергию  $\sim 20$  эВ). На больших временах этот фронт размывается за счет взаимодействия со средой.

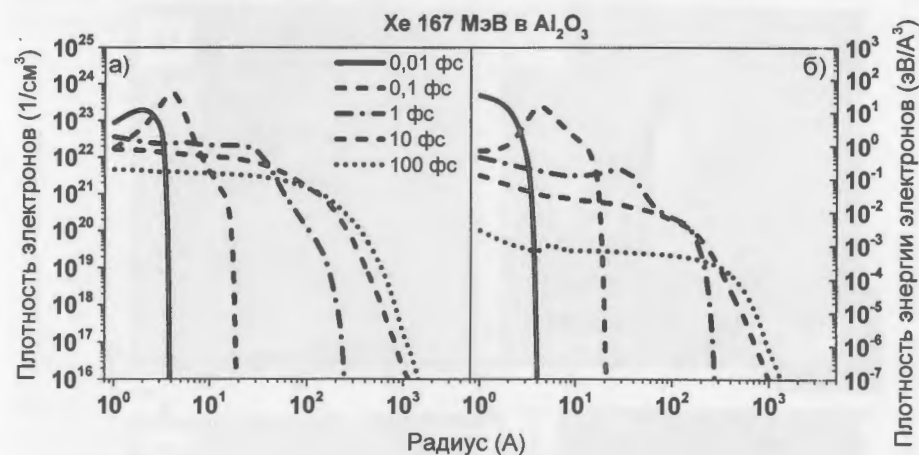
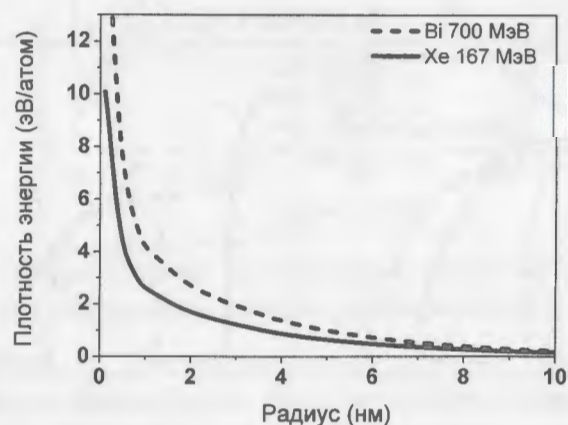


Рис. 2 (а) Радиальная зависимость плотности электронов и (б) их энергии в треке иона ксенона с энергией 167 МэВ в оксиде алюминия.

В главе демонстрируется важность пространственного перераспределения валентных дырок и их взаимодействия с ионной подсистемой материала для описания возбуждения материала БТИ. Доля энергии, вносимая дырками в ионную подсистему материала, сравнима с долей энергии, вносимой делокализованными электронами, причем область наибольшего влияния взаимодействия дырок с решеткой сосредоточена на расстояниях до 10 нм от центра трека.

В качестве важного результата, представленного в главе, можно указать определение временных масштабов кинетики электронной подсистемы материала в треке БТИ. Показано, что ионизационные каскады заканчиваются примерно на временах  $\sim 50$  фс после пролета иона, передача энергии в решетку материала электронами и дырками заканчивается на временах  $\sim 200$  фс, причем взаимодействие дырок с решёткой длится лишь до 80-100 фс.

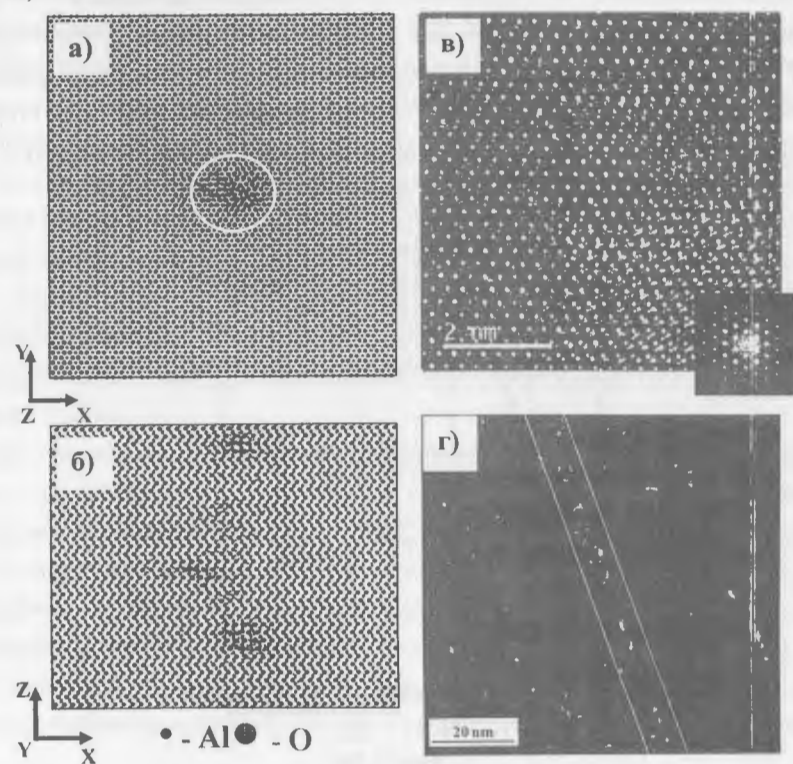
На Рис. 3 показано радиальное распределение избыточной энергии, переданной свободными электронами и дырками в ионную подсистему  $\text{Al}_2\text{O}_3$  на временах 100 фс после пролета иона, когда большая часть энергии уже передана в решетку.



**Рис. 3** Радиальная зависимость избыточной энергии ионной подсистемы оксида алюминия после пролета ионов Xe с энергией 167 МэВ и Bi с энергией 700 МэВ.

В третьей главе (Моделирование релаксации ионной подсистемы в треке БТИ методами молекулярной динамики) на основе результатов, полученных с помощью Монте-Карло модели, исследуется релаксация возбуждения ионной подсистемы материала в треке БТИ методами классической молекулярной динамики. Результаты применения этого подхода затем были проанализированы и сопоставлены с экспериментальными данными просвечивающей электронной микроскопии облученных образцов  $\text{Al}_2\text{O}_3$  [5].

На Рис. 4а,б показан результат моделирования структурных изменений вдоль траектории иона Xe с энергией 167 МэВ в оксиде алюминия в рамках описанного подхода. Прохождения иона через материал вызывает формирование прерывистой цилиндрической поврежденной области, которая не является полностью аморфизованной. Поперечный размер структурно-изменённой области  $\sim 1,8-2$  нм, что хорошо согласуется с экспериментальными данными из [5] (Рис. 4в,г). Согласно снимкам просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ), поврежденная область представляет собой материал с искаженной решеткой, однако не является аморфной (см. дифракционные контрасты на Рис. 4в).

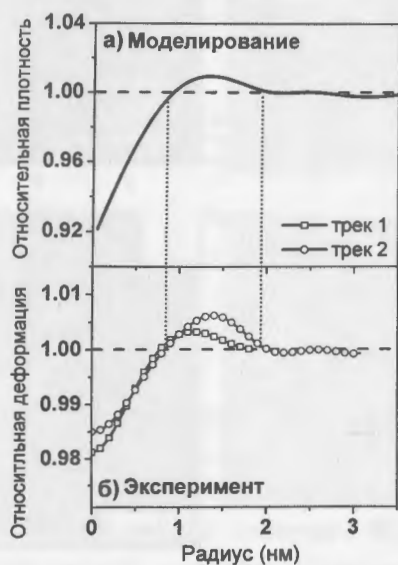


**Рис. 4** (а) Результат моделирования пролета иона ксенона 167 МэВ в  $\text{Al}_2\text{O}_3$ : проекция вдоль оси Z, (б) проекция вдоль оси Y. Размер кристаллита  $9,4 \times 9,8 \times 7,7$  нм<sup>3</sup>. (в) ПЭМ изображение

высокого разрешения вдоль оси с, (г) снимок ПЭМ в поперечном направлении [10] (г).

На снимке ПЭМ поперечного сечения образца (Рис. 4г) видны контрасты округлой формы, которые можно описать как пороподобные области с пониженной плотностью [10]. Размеры этих формирований составляют 1,1-1,3 нм. Поперечный размер трековой области составляет 0,7-1,9 нм [5].

Моделирование изменения плотности  $Al_2O_3$  (Рис. 5а) также свидетельствует, что центральная наиболее поврежденная область диаметром  $\sim 1,8$  нм имеет пониженную плотность ( $\sim 7\%$ ). Эта область трека окружена оболочкой с повышенной плотностью материала ( $\sim 1\%$ ) и диаметром  $\sim 4$  нм. На Рис. 5б для сравнения показаны относительные деформации вокруг траектории иона, полученные с помощью фазового анализа изображений ПЭМ [5]. Можно наблюдать, что характерные размеры и магнитуа структуры ядро-оболочка хорошо согласуются для теоретических и экспериментальных данных.



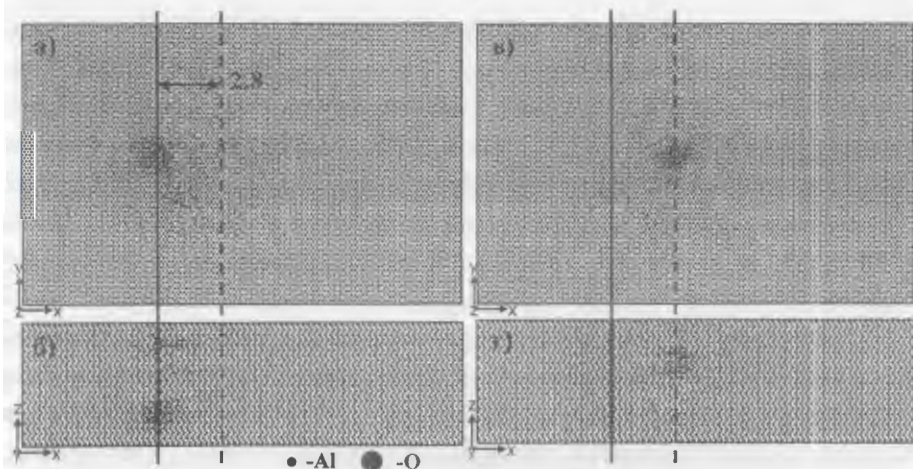
**Рис. 5** (а) Рассчитанная радиальная зависимость плотности  $Al_2O_3$  вокруг траектории иона. (б) Относительная деформация, определенная с помощью анализа снимков ПЭМ [5].

В главе демонстрируется результат расчета порога формирования трека  $dE/dx_{th}$  по ионизационным потерям налетающего иона. Для определения этой величины была проведена серия моделирований пролета ионов с различными  $dE/dx$ , после чего полученная кривая была экстраполирована в область нулевого значения радиуса трека, что соответствует  $dE/dx_{th} \sim 7$  кэВ/нм. Этот результат достаточно хорошо согласуется с величиной, полученной экспериментальным путем ( $\sim 10$  кэВ/нм) [10].

Материалы ядерных реакторов, использование которых предполагает тесный контакт с ядерным топливом, подвергаются облучению осколками деления до очень высоких флюенсов ( $\sim 10^{16}$  см $^{-2}$ ). Это приводит к многократному перекрытию трековых областей, и поэтому исследование кинетики процессов, происходящих при взаимодействии треков ионов между собой, имеет принципиальное значение для изучения радиационной стойкости материалов.

Экспериментальное исследование зависимости числа треков от флюенса ионов Хе с энергией 167 МэВ выявило, что количество треков на единицу площади образца достигает насыщения при дозах около  $1,1 \times 10^{12}$  см $^{-2}$ . Таким образом, на один трек, создаваемый ионом ксенона, приходится площадь около 90 нм $^2$ . Предполагая, что этот трек имеет цилиндрическую форму, можно определить эффективный радиус трековой области  $\sim 5,4$  нм.

Для исследования механизмов, приводящих к насыщению числа треков в зависимости от дозы, было проведено моделирование последовательного пролета двух ионов ксенона на некотором расстоянии друг от друга. Результат этого моделирования демонстрируется на Рис. 6. Как первый, так и второй трек имеют размеры и структуру, близкую к тем, что показаны на Рис. 6а. Хорошо видно, что пролет второго иона на расстоянии 2,8 нм от первого приводит практически к полному восстановлению исходной структуры в существующей трековой области.



**Рис. 6** Результат моделирования пролета двух ионов Хе. Траектории ионов параллельны и направлены вдоль оси Z. Сплошная вертикальная линия указывает на траекторию первого иона, штрихованная – второго иона: (а) проекция ячейки вдоль оси Z и (б) проекция вдоль оси Y после пролета первого иона; (в) проекция вдоль оси Z и (г) проекция вдоль оси Y после пролета второго иона на расстоянии  $\sim 2,8$  нм от первого. Размер кристаллита  $18,8 \times 12,2 \times 5,25$  нм<sup>3</sup>.

Подобное восстановление структуры при перекрытии трековых областей может служить объяснением наблюдаемого экспериментально насыщения количества треков при увеличении флюенса облучения. В данной работе был определен максимальный эффективный радиус трековой области, в которой может наблюдаться восстановление исходной структуры материала, и его значение составило  $\sim 6,5$  нм.

В **заключении** изложены основные результаты и выводы работы:

1. Разработана микроскопическая, основанная на формализме динамического структурного фактора и комплексной диэлектрической функции, количественная Монте-Карло модель, описывающая возбуждение и релаксацию электронной подсистемы в треке БТИ.
2. Исследована пространственно-временная кинетика возбуждения электронной и ионной подсистем оксида алюминия БТИ и оценены

характерные времена и пространственные масштабы различных процессов, протекающих в релаксирующем треке БТИ.

3. Результаты Монте-Карло расчетов были использованы в модели молекулярной динамики для описания кинетики релаксации ионной подсистемы  $Al_2O_3$  и структурных изменений в треке иона ксенона.
4. Исследование взаимодействия трековых областей от разных ионов между собой выявило восстановление исходной структуры в треках БТИ в оксиде алюминия. Наличие этого эффекта позволяет качественно объяснить наблюдаемое экспериментально насыщение количества треков ( $1,1 \times 10^{12}$  см<sup>-2</sup>) в зависимости от флюенса ионов. В работе было определено эффективное расстояние между осями треков, при котором наблюдается восстановление структуры в поврежденной области. Это расстояние равно  $\sim 6,5$  нм, что соответствует флюенсу  $\sim 8,8 \times 10^{11}$  см<sup>-2</sup>.

## Список литературы

- 1] F.F. Komarov *Defect and track formation in solids irradiated by superhigh-energy ions* // Physics-Uspekhi 46 (2003) 1253–1282.
- 2] C.J. Powell, A. Jablonski *Evaluation of Calculated and Measured Electron Inelastic Mean Free Paths Near Solid Surfaces* // J. Phys. Chem. Ref. Data 28 (1999) 19.
- 3] J.P. Ziegler, U. Biersack, J.F. Littmark *The Stopping and Range of Ions in Solids* // New York: Pergamon Press, 1985.
- 4] P.L. Grande, G. Schiwietz *CasP* // Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B 267 (2009) 859–863.
- 5] J.H. O'Connell, R.A. Rymzhanov, V.A. Skuratov, A.E. Volkov, N.S. Kirilkin *Latent tracks and associated strain in Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> irradiated with swift heavy ions* // Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B 374 (2016) 97–101.
- 6] N.A. Medvedev, R.A. Rymzhanov, A.E. Volkov *Time-resolved electron kinetics in swift heavy ion irradiated solids* // J. Phys. D. Appl. Phys. 48 (2015) 355303.
- 7] R.H. Ritchie, A. Howie *Electron excitation and the optical potential in electron microscopy* // Philos. Mag. 36 (1977) 463–481.
- 8] L. Van Hove *Correlations in Space and Time and Born Approximation Scattering in Systems of Interacting Particles* // Phys. Rev. 95 (1954) 249–262.
- 9] W.H. Barkas *Nuclear research emulsions*. // New York: Academic Press, 1963.
- 10] V.A. Skuratov, J. O'Connell, N.S. Kirilkin, J. Neethling *On the threshold of damage formation in aluminum oxide via electronic excitations* // Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B 326 (2014) 223–227.

## Основные публикации автора

1. N.A. Medvedev, R.A. Rymzhanov, A.E. Volkov *Complex dielectric function formalism for description of the electron kinetics in swift heavy ion tracks in LiF and Y<sub>2</sub>O<sub>3</sub>* // Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B 315 (2013) 85–89.
2. R.A. Rymzhanov, N.A. Medvedev, A.E. Volkov *Monte-Carlo modeling of excitation of the electron subsystem of Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> and polyethylene after swift heavy ion impact* // Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B 326 (2014) 238–242.
3. S.A. Gorbunov, N.A. Medvedev, R.A. Rymzhanov, P.N. Terekhin, A.E. Volkov *Excitation and relaxation of olivine after swift heavy ion impact* // Nucl. Instruments Methods Phys. Res. B. 326 (2014) 163–168.
4. R.A. Rymzhanov, N.A. Medvedev, A.E. Volkov *Effect of atomic structure on excitation of the electronic subsystem of a solid by a swift heavy ion* // Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B 354 (2015) 292–296.
5. R.A. Rymzhanov, N.A. Medvedev, A.E. Volkov *Electron emission from silicon and germanium after swift heavy ion impact* // Phys. Status Solidi B 252 (2015) 159–164.
6. P.N. Terekhin, R.A. Rymzhanov, S.A. Gorbunov, N.A. Medvedev, A.E. Volkov *Effect of valence holes on swift heavy ion track formation in Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>* // Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B 254 (2015) 200–204.
7. N.A. Medvedev, R.A. Rymzhanov, A.E. Volkov *Time-resolved electron kinetics in swift heavy ion irradiated solids* // J. Phys. D. Appl. Phys. 48 (2015) 355303.
8. R.A. Rymzhanov, N.A. Medvedev, A.E. Volkov *Effect of valence holes kinetics on material excitation in tracks of swift heavy ions* // Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B 365 (2015) 462–467.
9. R.A. Voronkov, R.A. Rymzhanov, N.A. Medvedev, A.E. Volkov *Monte-Carlo modeling of excitation of the electron subsystem of ZnO and MgO in*

*tracks of swift heavy ions* // Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B 365 (2015) 468–471.

0. S.A. Gorbunov, R.A. Rymzhanov, N.I. Starkov, A.E. Volkov, A.I. Malakhov *A model of chemical etching of olivine in the vicinity of the trajectory of a swift heavy ion* // Nucl. Instruments Methods Phys. Res. B 365 (2015) 656–662.

1. J.H. O'Connell, R.A. Rymzhanov, V.A. Skuratov, A.E. Volkov, N.S. Kirilkin *Latent tracks and associated strain in  $Al_2O_3$  irradiated with swift heavy ions* // Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B 374 (2016) 97–101.

2. J.H. O'Connell, R.A. Rymzhanov, V.A. Skuratov *Track interference in swift heavy ion irradiated  $Al_2O_3$* . Сборник материалов конференции Взаимодействие излучений с твердым телом-2015. 2015, Минск, Беларусь. с. 286–288.

Получено 11 октября 2017 г.