

Simulation of damage threshold and structure in swift heavy ion tracks in Al₂O₃

R. A. Rymzhanov¹, N.A. Medvedev^{2,3}, A.E. Volkov^{1,4,5}, V.A. Skuratov¹

(1) *FLNR, JINR, Dubna, Russia;*

(2) *Department of Radiation and Chemical Physics, Institute of Physics, Prague, Czech Republic;*

(3) *Laser Plasma Department, Institute of Plasma Physics, Prague, Czech Republic;*

(4) *NRC 'Kurchatov Institute', Moscow, Russia;*

(5) *Lebedev Physical Institute of the Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia.*

Abstract

Structure changes and their formation threshold in swift heavy ion tracks in Al₂O₃ are studied using a combined start-to-end numerical model. The hybrid approach consists of the Monte-Carlo code TREKIS, describing kinetics of the electronic subsystem, and classical Molecular Dynamics for the lattice atoms.

Simulations of Bi 700 MeV ion impacts show that relaxation of the excess lattice energy results in formation of a cylindrical disordered region of about 3.5 nm in diameter. Recent transmission electron microscope observations agree with these results. The threshold of a swift heavy ion track formation is estimated to be ~6.1 keV/nm. Calculated X-ray diffraction patterns of irradiated material demonstrate more pronounced damage of the Al atoms sublattice near swift heavy ion trajectories.

Modeling of overlapping ion tracks demonstrates that damaged area can be restored to a near virgin state. The estimation of a maximal effective distance of recovery yields values of about 6.5 nm (7.8 nm) between the Xe 167 MeV (Bi 700 MeV) ion trajectories, which are close to those estimated from the saturation density of latent ion tracks detected by TEM.

Моделирование порога образования и структуры треков быстрых тяжелых ионов в Al_2O_3

Р.А. Рымжанов¹, Н.А. Медведев, А.Е. Волков, В.А. Скуратов¹

(1) ЛЯР ОИЯИ, г. Дубна, Россия;

(2) Department of Radiation and Chemical Physics, Institute of Physics, Prague, Czech Republic;

(3) Laser Plasma Department, Institute of Plasma Physics, Prague, Czech Republic;

(4) НИЦ «Курчатовский институт», г. Москва, Россия;

(5) Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН, г. Москва, Россия.

Аннотация

Структурные изменения и порог их формирования в треках быстрых тяжелых ионов в оксиде алюминия исследуются с использованием комбинированной численной модели. Гибридный подход состоит из кода Монте-Карло TREKIS, описывающего кинетику электронной подсистемы, и классической молекулярной динамики для описания релаксации атомов решетки.

Моделирование воздействия ионов Bi с энергией 700 МэВ показало, что релаксация избыточной энергии решетки приводит к образованию цилиндрической поврежденной области диаметром около 3,5 нм. Это находится в согласии с результатами исследований облученных образцов с помощью просвечивающей электронной микроскопии. Пороговое значение формирования трека тяжелого иона оценивается в $\sim 6,1$ кэВ/нм. Расчетные рентгенограммы облученного материала демонстрируют, что подрешетка атомов Al повреждается сильнее, чем подрешетка атомов кислорода.

Моделирование перекрывающихся треков ионов показывает, что поврежденная область может быть восстановлена до почти неповрежденного состояния. Оценка максимального эффективного расстояния восстановления дает значения около 6,5 нм (7,8 нм) между ионами Xe 167 МэВ (Bi 700 МэВ), что хорошо согласуется с экспериментальными оценками плотности насыщения треков ионов.