



## Влияние диффузии валентных дырок на возбуждение $Al_2O_3$ в треках быстрых тяжелых ионов

*Р.А. Рымжанов<sup>1</sup>, J. O'Connell<sup>2</sup>, В.А. Скуратов<sup>1</sup>, Н.А. Медведев<sup>3</sup>, А.Е. Волков<sup>1,4</sup>*

<sup>1</sup>Лаборатория ядерных реакций ОИЯИ, г.Дубна, Россия

<sup>2</sup>CHRTEM, Nelson Mandela Metropolitan University, Port Elizabeth, South Africa

<sup>3</sup>CFEL at DESY, Notkestr. 85, 22607 Hamburg, Germany

<sup>4</sup>НИЦ «Курчатовский институт», г. Москва, Россия

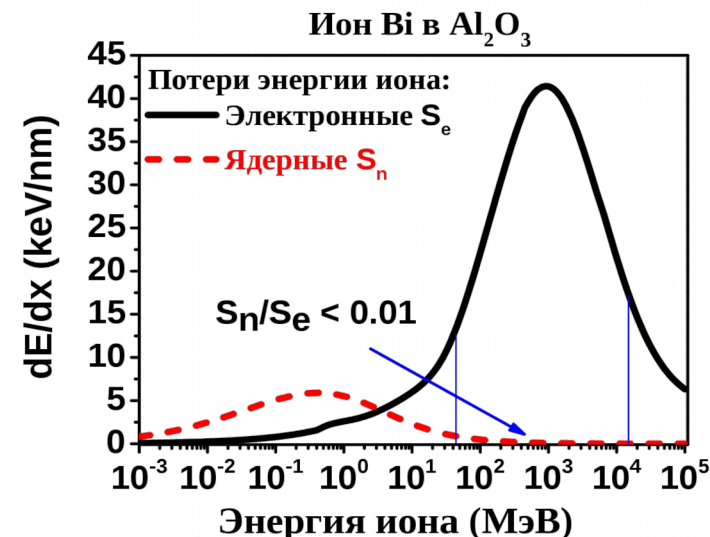
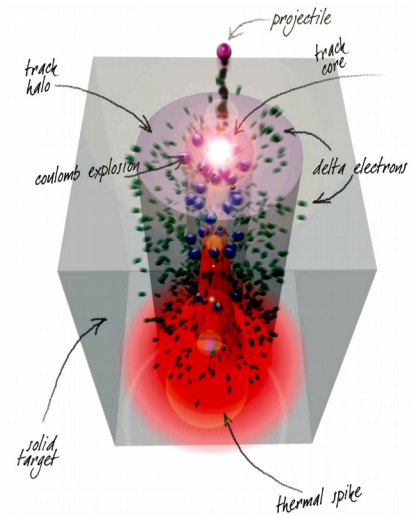


# Быстрые тяжелые ионы



- $E > 1 \text{ МэВ/нуклон}$ ,  $M > 4m_p$
- Потери энергии на электронное торможение
- Моделирование воздействия осколков деления и космических лучей на свойства материалов

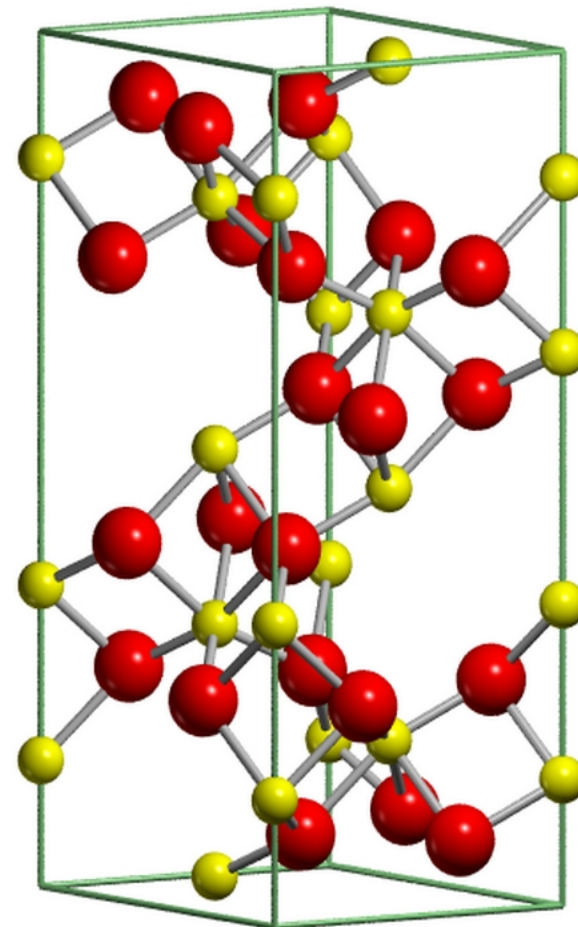
Marek Skupinski  
(Uppsala)



# Почему $\text{Al}_2\text{O}_3$ ?



- Радиационно-стойкий материал
- Кандидат на роль инертной матрицы для ядерного топлива в реакторах деления
- Широкощелевой диэлектрик – использование в электронике
- Необходимо экспериментальное и теоретическое исследование влияния облучения осколками деления на свойства материала





Модель термической вспышки —  
использует макроскопическое уравнение диффузии,  
применение которого затруднено в условиях  
наномасштаба и малых времен процессов в треках  
БТИ.

Константа электрон-фононной связи используется как  
подгоночный параметр



Необходимо построение новых мультимасштабных  
моделей для описания процессов в треках БТИ

# Формализм комплексной диэлектрической функции

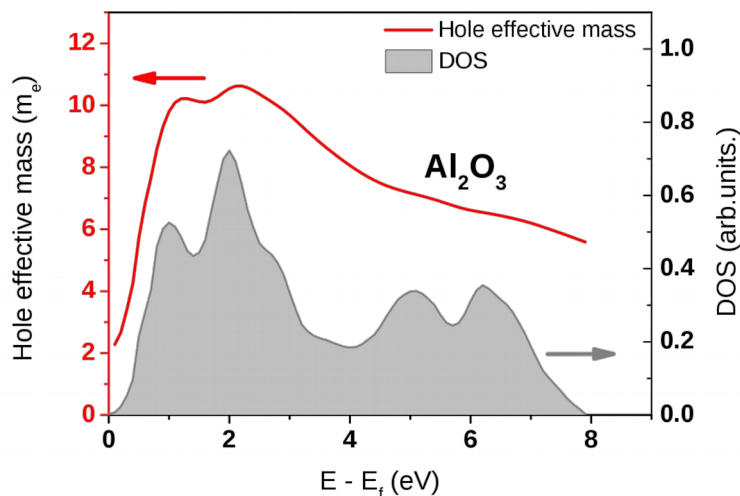


Учитывает коллективную реакцию системы на возбуждение

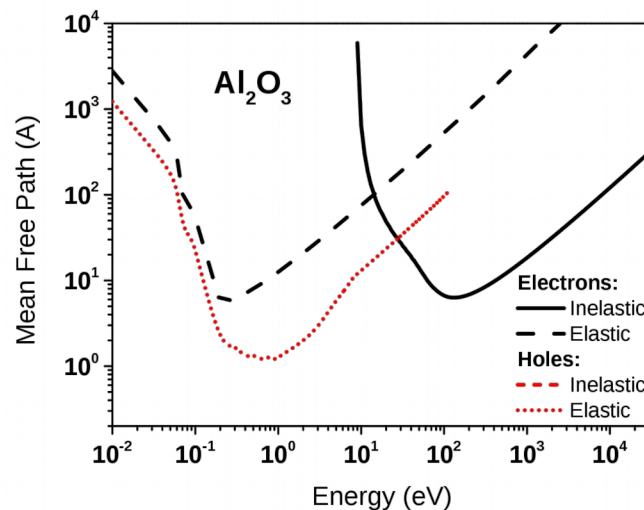
$$\frac{d^2\sigma}{d(\hbar\omega)dq} = \frac{2(Z_e e)^2}{n_e \pi \hbar^2 v^2} \frac{1}{q} \operatorname{Im} \left( \frac{-1}{\epsilon(\omega, \mathbf{q})} \right)$$

**Введен учет диффузии валентных дырок!!!**

Эффективная масса из плотности электронных состояний

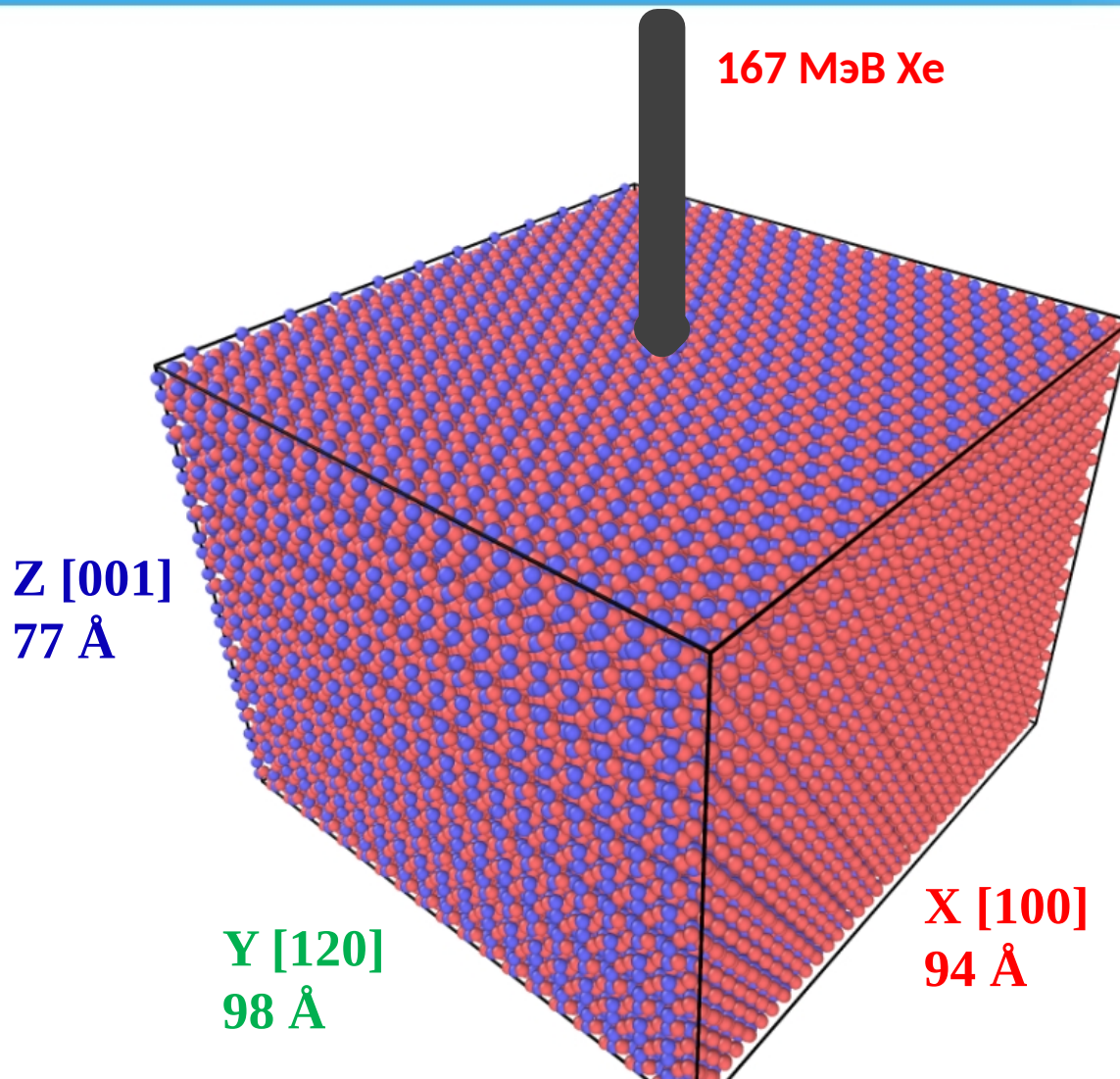


Свободные пробеги электронов и дырок



R.H. Ritchie, A. Howie, *Philos. Mag.* 36 (1977) 463–481

R.A. Rymzhanov, N.A. Medvedev, A.E. Volkov, *Nucl. Instrum. Methods. B.* 326 (2014) 238–242.

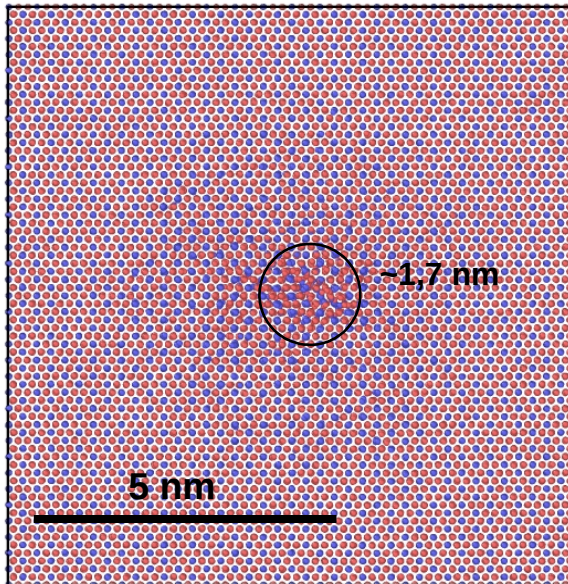


МД пакет **LAMMPS**

- Пространственная группа R-3c.
- Размеры 94 x 98 x 77 Å
- 86400 атомов

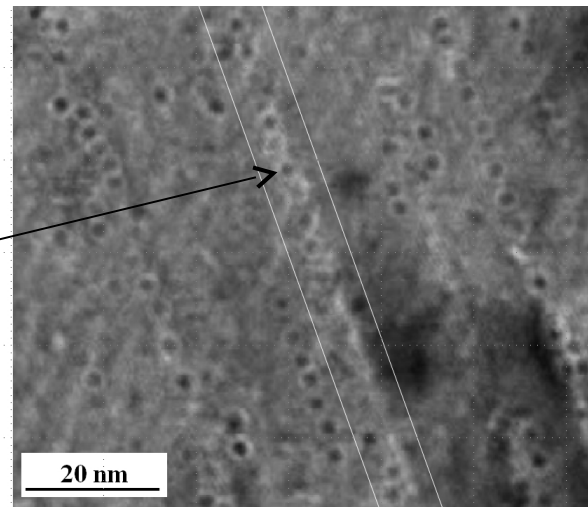
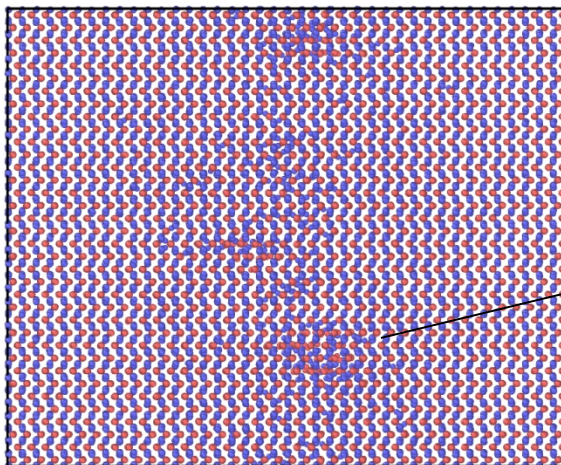
$$V(r_{ij}) = \frac{Q_i Q_j}{r_{ij}} - \frac{A_{ij}}{r_{ij}^6} + B_{ij} e^{\frac{r_{ij}}{C_{ij}}}$$

# Результаты МД

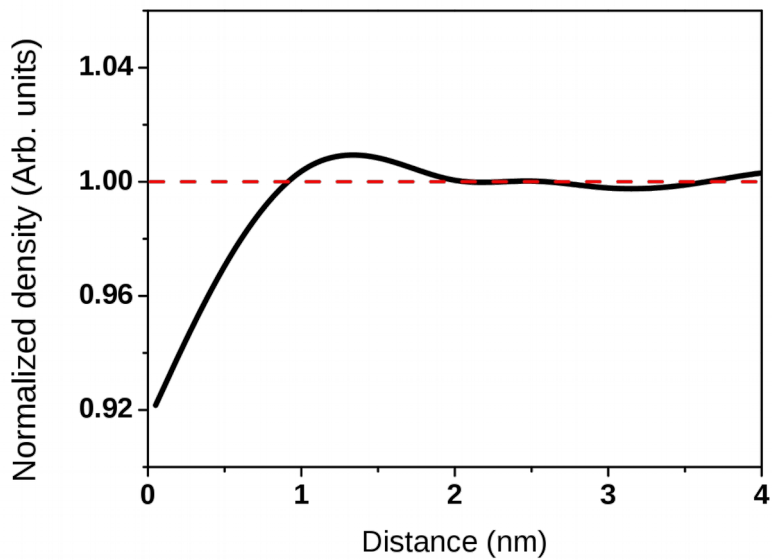
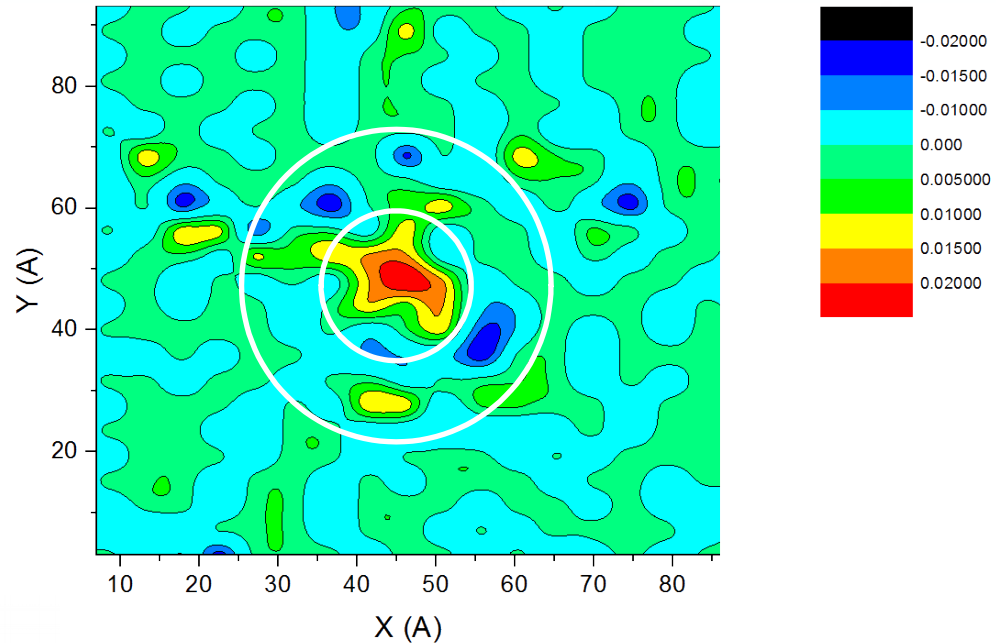
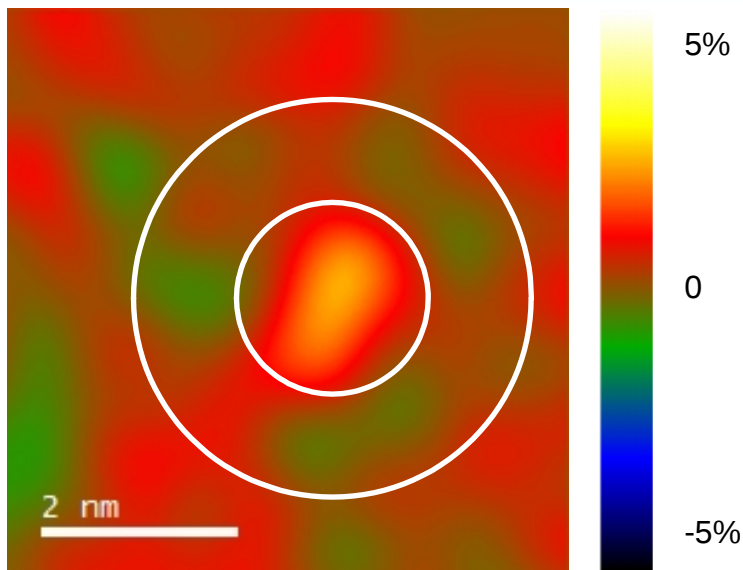


Ион Хе 167 МэВ  
ИЦ-100 ЛЯР ОИЯИ

ПЭМ микроскопия



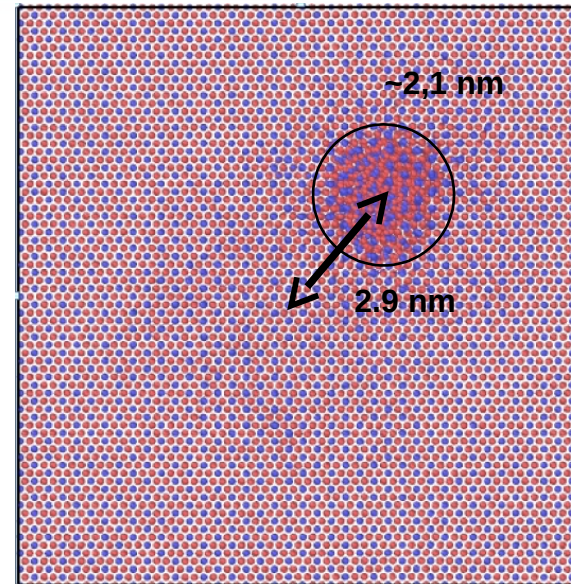
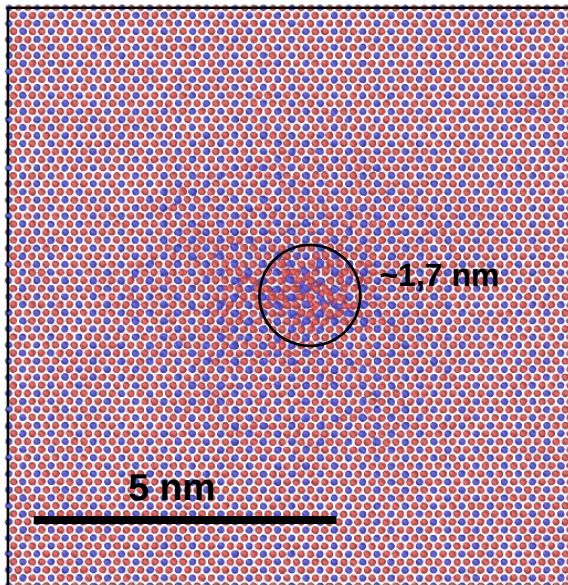
# Деформационное поле



Плотность материала  
вокруг поврежденной  
области



# Результаты МД



Наблюдаемое количество треков меньше флюенса ионов. Уровень насыщения для иона Хе –  $1.2 \times 10^{12} \text{ см}^{-2}$

Возможная причина согласно МД – термическая рекристаллизация (отжиг). Эффективный радиус для Хе – 6.5 нм, что соответствует уровню насыщения  $\sim 2.5 \times 10^{12} \text{ см}^{-2}$

# Заключение



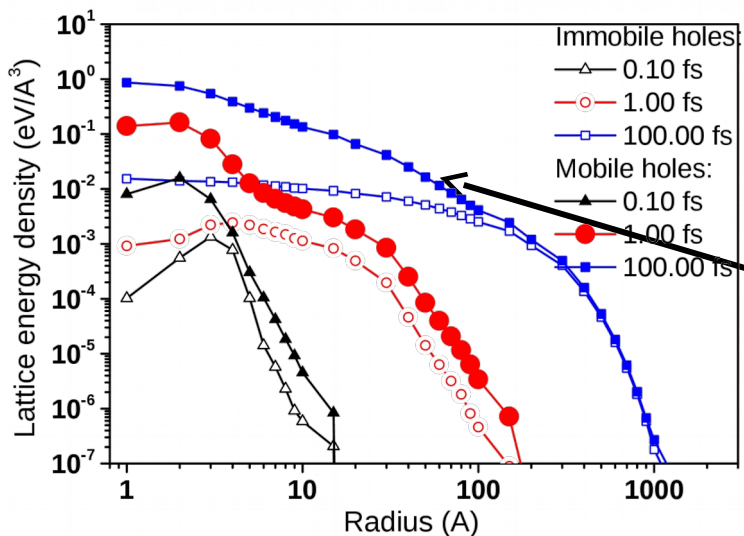
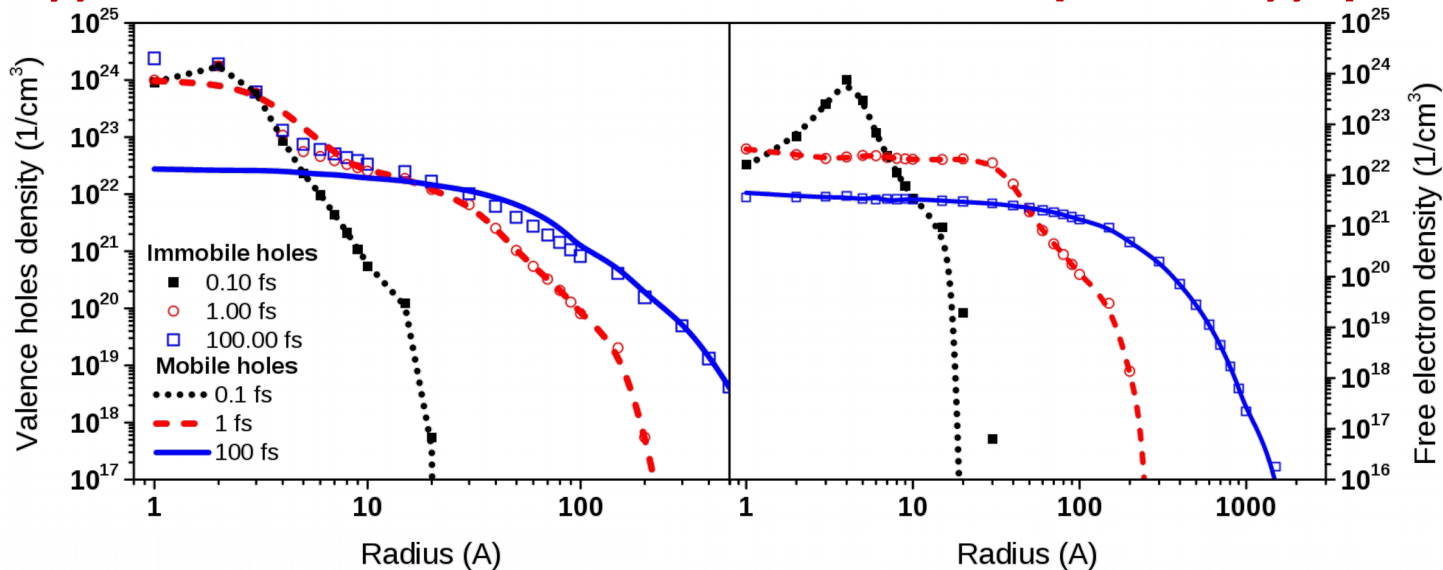
- Построена модель возбуждения материала в треках БТИ
- Продемонстрирована важность диффузии валентных дырок для процессов возбуждения и релаксации материала
- Модель показала хорошее согласие с экспериментальными данными
- Выявлен эффект рекристаллизации трековых областей. Максимальный эффективный радиус рекристаллизации составляет  $\sim 6$  нм.



Спасибо за внимание!

# Моделирование возбуждения электронной подсистемы (код TREKIS)

## Радиальная зависимость плотности электронов и дырок



**Вклад валентных дырок может  
составлять до 50% всей  
передаваемой в решетку энергии**

**Радиальный профиль нагрева решетки  
был использован в молекулярно-  
динамическом моделировании  
релаксации избыточной энергии атомов**