

На правах рукописи

**ТЕРЕХИН Павел Николаевич**

**КОЛИЧЕСТВЕННАЯ МОДЕЛЬ ВОЗБУЖДЕНИЯ МАТЕРИАЛОВ В  
ТРЕКАХ БЫСТРЫХ ТЯЖЕЛЫХ ИОНОВ**

01.04.07 – Физика конденсированного состояния

Автореферат  
диссертации на соискание учёной степени  
кандидата физико-математических наук



Москва – 2014

Работа выполнена в Институте общей и ядерной физики  
Национального исследовательского центра «Курчатовский институт»

**Научный руководитель:** кандидат физико-математических наук

**Волков Александр Евгеньевич**

**Официальные оппоненты:** **Калашников Николай Павлович**, доктор физико-математических наук, профессор. Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», заведующий кафедрой общей физики.

**Стегайлов Владимир Владимирович**, доктор физико-математических наук, доцент. ОИВТ РАН НИЦ-1 Теплофизики экстремальных состояний, заведующий отделом компьютерной теплофизики.

**Ведущая организация:** Научно-исследовательский институт ядерной физики имени Д.В. Скобельцына Московского государственного университета имени М.В. Ломоносова.

Защита диссертации состоится «23» октября 2014 г. в 16 ч. 30 мин. на заседании диссертационного совета Д **520.009.01** на базе НИЦ «Курчатовский институт» по адресу: 123182, г. Москва, пл. Академика Курчатова, д.1.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке НИЦ «Курчатовский институт» и на сайте [www.nrcki.ru](http://www.nrcki.ru).

Автореферат разослан «    » \_\_\_\_\_ 20   г.

Ученый секретарь диссертационного совета,  
кандидат физико-математических наук



А.В. Мерзляков

## ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

### Актуальность темы исследования

Быстрые тяжелые ионы (БТИ,  $E > 1$  МэВ/нуклон,  $M > 20m_p$ ,  $m_p$  – масса протона) теряют большую часть своей энергии в твердом теле на возбуждение его электронной подсистемы ( $> 95\%$ ,  $5 - 40$  КэВ/нм). Последующая релаксация электронного возбуждения, сопровождающаяся передачей энергии и импульса в решетку, может вызывать необычные структурно-фазовые изменения в нанометрической окрестности траектории иона (трек БТИ), что может служить основой для технологических применений.

Знание физики эффектов, связанных с прохождением БТИ, важно для оценки радиационной стойкости материалов к облучению осколками деления (ОД). Длина пробега БТИ ( $\sim 10 - 100$  мкм) дает возможность производить структурные изменения в слоистых и структурированных наноразмерных системах. Облучение БТИ стимулирует образование цепочек нанокластеров и/или изменение формы нанокластеров, содержащихся в облучаемой матрице. Отрабатываются основанные на облучении БТИ технологии производства нанопроволок и нанотрубок, в том числе интегрированных в материал. Промышленное производство полимерных фильтров базируется на облучении БТИ и последующем травлении полимерных пленок. Ионно-лучевая терапия применяется для лечения онкологических заболеваний. Исследуются задачи модификации генетического материала пучками БТИ.

Отработка технологий наноразмерных структурно-фазовых превращений, стимулированных облучением БТИ, невозможна без создания модели, предоставляющей количественную информацию о параметрах экстремально возбужденного материала в треке, поскольку экспериментальная фиксация этих параметров чрезвычайно затруднена [1].

Эта задача представляет и фундаментальный интерес, так как пространственные и временные масштабы кинетики возбуждения и

релаксации материала в окрестности траектории БТИ настолько малы ( $\sim 10$  нм,  $1$  фс -  $1$  пс), а интенсивность возбуждения настолько велика, что применение для описания этой кинетики моделей, основанных на предположении локального термодинамического равновесия и использующих макроскопические параметры и подходы, слабо обосновано.

### **Цели и задачи работы**

1) Построение основанной на общих фундаментальных принципах микроскопической количественной модели возбуждения материалов в наноразмерных треках БТИ, учитывающей возможность реализации различных предельных случаев пространственно-временной корреляции в динамике атомов на пикосекундном временном масштабе кинетики возбуждения и начальной стадии релаксации решётки в треке.

2) Исследование эффекта реализации различных предельных случаев пространственно-временной корреляции в динамике атомов решётки на скорость передачи энергии и импульса в ионную подсистему материала в зависимости от параметров возбужденного электронного ансамбля в треке БТИ.

3) Оценка стимулированного релаксацией электронной подсистемы нагрева решётки диэлектриков на примере материалов, допускающих ясную экспериментальную проверку.

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

1. Микроскопическая, основанная на формализме динамического структурного фактора (ДСФ), количественная модель, описывающая возбуждение решётки в результате релаксации электронной подсистемы в треке БТИ.

2. Численный алгоритм, реализующий построенную модель.

3. Зависимость скорости передачи энергии и импульса в решетку от температуры электронного ансамбля. Сравнение электрон-решёточных

факторов скорости передачи энергии (Al), используемых в моделях других авторов [2-4], и фактора скорости передачи энергии, полученного в представляемой модели.

4. Результаты применения разработанной модели к системам, допускающим экспериментальную проверку. Величины параметров, характеризующих возбужденное состояние решетки LiF и оливина ( $Mg_2SiO_4$ ) в треке БТИ. Сравнение электрон-решёточных факторов скорости передачи энергии (LiF): используемого в модели двухтемпературной термической вспышки (ТВ) и полученного в представляемой модели.

#### **Научная новизна работы состоит в:**

- разработке количественной модели, основанной на формализме ДСФ, описывающей кинетику передачи энергии и импульса от релаксирующего ансамбля делокализованных электронов в решетку в треке БТИ и автоматически реализующей различные предельные случаи динамической реакции решётки на вносимое возбуждение;

- разработке численного алгоритма: Молекулярно Динамическая (МД) программа расчета ДСФ, молекулярно-кинетический метод расчета пространственного распространения электронов, расчет скорости передачи энергии от электронов в решетку – для реализации предложенной модели и определения пространственно-временных распределений величин параметров, формирующих движущие силы и условия протекания структурно-фазовых превращений в треках БТИ в различных материалах (пространственно-временные распределения избыточной энергии и импульса, температуры электронов и решётки);

- исследовании эффекта реализации различных предельных случаев пространственно-временной корреляции в динамике атомов на зависимость скорости передачи энергии в ионную подсистему мишени от температуры электронного ансамбля;

- сравнении результатов применения разработанного подхода с экспериментальными данными (LiF, оливин ( $Mg_2SiO_4$ )).

### **Достоверность**

Применимость разработанной модели для описания кинетики возбуждения материалов в треках БТИ обосновывается тем, что:

1. Модель базируется на общих фундаментальных принципах и использует минимальное количество упрощающих приближений.

2. В расчетах применяются МД алгоритмы и потенциалы, которые широко используются сообществом.

3. Низкотемпературная часть зависимости скорости передачи энергии в решетку алюминия от величины электронной температуры согласуется с расчетами других авторов [2-4] и экспериментальными результатами [5-7].

4. Полученный небольшой нагрев треков БТИ в LiF согласуется с экспериментальными оценками [8] и не может быть объяснен моделью термической вспышки. Рассчитанный уровень возбуждения решетки коррелирует со структурными изменениями, которые наблюдаются в оливине [9] и не обнаруживаются в LiF [8].

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

- Построена количественная модель, описывающая возбуждение материала в наноразмерном треке БТИ. Разработан численный алгоритм, реализующий эту модель. Исследовано влияние различных предельных случаев пространственно-временной корреляции в динамике атомов на величину скорости передачи энергии от возбужденной электронной подсистемы в решетку в треке БТИ.

- Представляемая модель и результаты имеют фундаментальное значение для описания кинетики возникновения экстремального состояния вещества при релаксации его возбужденной электронной подсистемы.

- Получаемые в результате применения модели параметры возбужденного материала могут быть использованы в качестве начальных условий в моделях наноразмерных структурно-фазовых превращений, вызываемых релаксацией трековой области.

### **Методология и методы исследования**

В работе использовались аналитические и оригинальные численные методы исследований. Для описания кинетики и определения параметров возбужденной электронной подсистемы в треке БТИ применялась ранее разработанная Монте-Карло (МК) модель [10]. Для расчета ДСФ и исследования релаксации возбужденной атомной подсистемы материалов применялся метод МД.

### **Апробация работы**

Материалы, представленные в диссертации, были доложены на конференциях:

- 16-я Международная Конференция по Физике высоко заряженных ионов (НСИ-2012) (2 – 7 сентября 2012 г., г. Гейдельберг, Германия);
- Конференция Европейского Общества по Исследованию Материалов (E-MRS 2012) (17 – 21 сентября 2012 г., г. Варшава, Польша);
- 25-я Международная Конференция по атомным столкновениям в твердых телах (ICACS-25), (21 – 25 октября 2012 г., г. Киото, Япония);
- 10-ая Курчатовская молодежная научная школа (23 – 26 октября 2012 г., г. Москва, Россия);
- 17-я Международная Конференция по радиационным эффектам в диэлектриках (REI-2013) (30 июня – 5 июля 2013 г., г. Хельсинки, Финляндия);
- 28-я Международная Конференция по физике фотонных, электронных и атомных столкновений (ICREAS-28) (24 – 30 июля 2013 г., г. Ланьчжоу, Китай);

- 11-ая Курчатовская молодежная научная школа (12 – 15 ноября 2013 г., г. Москва, Россия).

### **Личный вклад автора**

- Выполнена аналитическая проработка основанной на формализме ДСФ модели обмена энергией и импульсом между электронной и ионной подсистемами твердого тела в треке БТИ.
- Разработан численный алгоритм, объединяющий МК модель кинетики возбуждения электронной подсистемы и оригинальную МД модель кинетики возбуждения атомной подсистемы материала в треке БТИ.
- Проведен расчет скорости передачи энергии от ансамбля делокализованных электронов в ионную подсистему материала (Al). Исследовано влияние различных предельных случаев пространственно-временной корреляции в динамике атомов решётки на зависимость этой скорости от электронной температуры.
- Определены временные зависимости возникающих радиальных распределений избыточного импульса и энергии решётки в нанометрической окрестности траектории БТИ в материалах, допускающих экспериментальную проверку (LiF, оливин ( $Mg_2SiO_4$ )).

### **Публикации автора**

По материалам диссертации опубликовано 10 печатных работ, из них 3 статьи в рецензируемых журналах, рекомендованных ВАК Минобрнауки РФ. Список всех публикаций автора приводится в конце автореферата.

### **Структура и объем работы**

Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения, списка цитируемой литературы. Работа содержит 97 страниц, включает 15 рисунков, 5 таблиц. Список цитированной литературы содержит 89 наименований.



## ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ ДИССЕРТАЦИИ

Во **введении** обоснована актуальность темы диссертации, сформулированы цели и задачи исследования, основные положения, выносимые на защиту, а также указаны научная новизна, достоверность, теоретическая и практическая значимость полученных результатов, методология и методы исследования, апробация работы и личный вклад автора.

В **первой главе** дается обзор модельных представлений об образовании треков БТИ, и показано современное состояние исследований по этой тематике.

Приведены примеры и краткие описания моделей, применявшихся на различных этапах изучения этой проблемы. Обсуждены преимущества и недостатки предлагавшихся моделей.

Рассмотрены современные численные и аналитические методы, применяющиеся для изучения механизмов трекообразования.

Указана принципиальная необходимость построения адекватной количественной модели возбуждения решётки при ее взаимодействии с релаксирующей электронной подсистемой в треке БТИ, без которой невозможно построение реалистичных моделей структурно-фазовых изменений, стимулированных облучением БТИ.

Определены ключевые проблемы, требующие решения, и обоснована мотивация выбора целей исследований, представленных в диссертации.

Во **второй главе** обосновывается применение формализма ДСФ для построения сечений взаимодействия релаксирующей электронной подсистемы с динамически и пространственно коррелированными атомами решетки в треке БТИ.

В рамках одноэлектронного приближения, первого порядка по теории возмущений и попарного взаимодействия между налетающим электроном и

атомами решетки скорость электрон-решёточного обмена энергией задается в виде:

$$Q_{el-ion} = \frac{4}{(2\pi)^5 \hbar} \int f_{\mathbf{k}_i} (1 - f_{\mathbf{k}_f}) \omega S(\omega, \mathbf{k}) |U(\mathbf{k}_i - \mathbf{k}_f)|^2 d\mathbf{k}_i d\mathbf{k}_f, \quad (1)$$

где  $\hbar$  - постоянная Планка,  $f_{\mathbf{k}}$  - функция распределения электронов,  $\mathbf{k} = \mathbf{k}_i - \mathbf{k}_f$ ,  $\hbar\omega = E_{\mathbf{k}_i} - E_{\mathbf{k}_f}$  - изменения волнового вектора и энергии налетающего электрона,  $U(\mathbf{k})$  - фурье-образ потенциальной энергии взаимодействия электрона с изолированным атомом решётки (экранированный кулоновский потенциал).

Динамический структурный фактор [11]

$$S(\mathbf{k}, \omega) = \frac{N}{2\pi} \int dt d\mathbf{r} e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)} G(\mathbf{r}, t) \quad (2)$$

( $N$  – количество рассеивающих атомов) является фурье-образом парной корреляционной функции  $G(\mathbf{r}, t)$ , которая учитывает пространственно-временные корреляции в положениях и динамике атомов решётки.

В главе демонстрируется, что при различных пространственно-временных характеристиках внешнего воздействия реализуются различные предельные случаи динамической реакции атомов решётки: например, (а) мгновенное приближение, которое возникает при временах воздействия много меньших времени атомных осцилляций, когда атомы решётки заморожены в своих текущих положениях и динамически независимы, и (б) гармоническое приближение, соответствующее малым колебаниям атомов вблизи положений равновесия в противоположном предельном случае. Для обоих случаев приведены выражения для ДСФ.

Для расчета ДСФ и описания возбуждения решётки в треке БТИ была разработана оригинальная МД программа. Для тестирования этой программы был выбран жидкий алюминий, для которого использовался многочастичный межатомный потенциал, полученный методом совпадения сил (force-matching method) [12]. Моделировалась система, состоящая из 500 атомов в термодинамическом равновесии. Момент равновесия фиксировался по

совпадению распределения энергий атомов с максвеловским распределением (2000 МД шагов) [13].

Рис.1 демонстрирует совпадение рассчитанного геометрического структурного фактора  $S(\mathbf{k}) = \int S(\mathbf{k}, \omega) d\omega$  жидкого алюминия с результатами эксперимента [14].

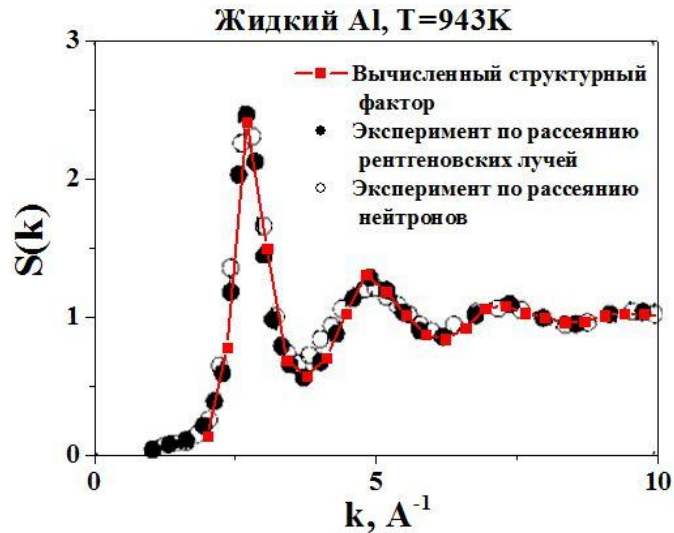


Рисунок 1. Геометрический структурный фактор жидкого алюминия [14].

Зависимости ДСФ жидкого алюминия от частоты  $\omega$  при фиксированном значении величины волнового вектора  $k$  сравниваются с экспериментом [15] на рис. 2.

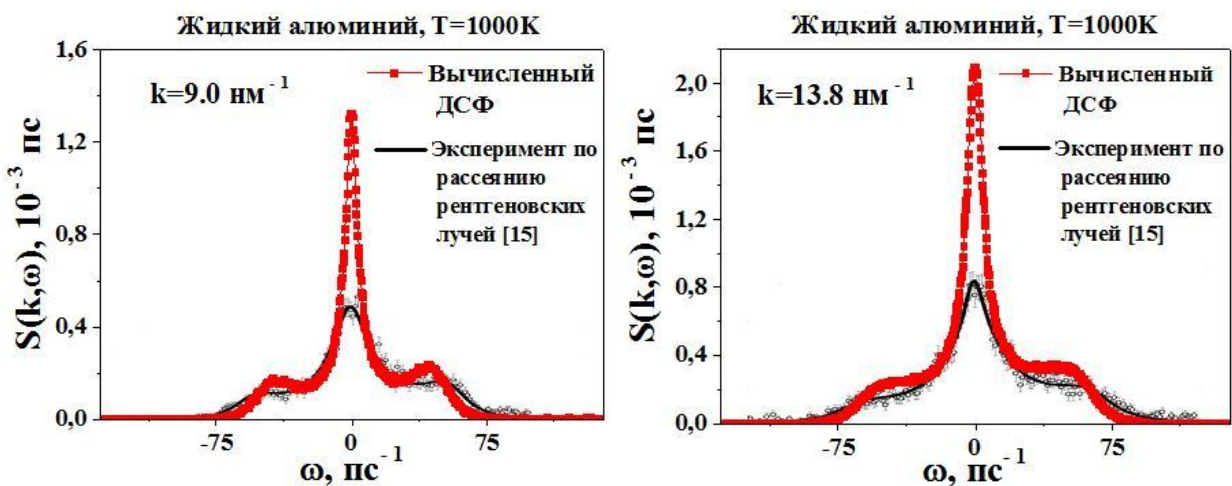


Рисунок 2. Динамический структурный фактор жидкого алюминия.

Анализ рис. 1 и 2 показывает, что численная процедура расчета ДСФ корректна. Небольшие отклонения результатов расчета от эксперимента на рис. 2 связаны с тем, что использованный МД потенциал не воспроизводит абсолютно точно динамических свойств Al, поскольку разрабатывался, в первую очередь, для моделирования упругих и пространственных свойств решётки, температуры плавления.

**Третья глава** посвящена описанию построенной микроскопической количественной модели возбуждения материалов в треках БТИ.

Резкое различие в характерных временах кинетики электронной и ионной подсистем позволило разделить модель на блоки, работающие на разных временных интервалах возбуждения трека БТИ.

На начальной стадии (до 10 фс после пролёта иона) использовалась ранее разработанная МК программа [10], моделирующая кинетику возбуждения электронной подсистемы в треке. Полученные в результате МК расчета пространственные распределения плотности делокализованных электронов и их энергии ко времени остановки ионизационных каскадов (~10 фс после пролёта иона) использовались как начальные условия для последующего моделирования распространения электронов и их взаимодействия с решёткой.

На времени 10 фс производился переход от МК моделирования электронной кинетики к молекулярно-кинетическому методу, который оперирует усредненными параметрами ансамбля делокализованных электронов. Область трека разделялась на цилиндрические слои толщиной большей длины пробега электронов, в которых предполагалось термализованное состояние электронного ансамбля. Распределение электронов по скоростям в каждом слое задавалось равновесной функцией распределения Ферми [16], определяемой текущей плотностью энергии и концентрацией электронов в каждом слое.

При последующем моделировании учитывались изменения концентрации и плотности энергии электронов в каждом слое в результате обмена

частицами и энергией между слоями, а также передачи части избыточной энергии в решётку.

Время передачи энергии от ансамбля электронов в решётку ограничивается временем охлаждения электронов в треке БТИ ( $\sim 100$  фс), меньшим времени установления теплового равновесия в ионной системе ( $\sim 200$  фс - 1 пс [13]). Поэтому для описания возбуждения решётки была выбрана характеризующая неравновесную систему кинетическая температура [13,17], соответствующая средней кинетической энергии атомов решётки. В равновесии она совпадает с термодинамической температурой. Это позволило описать кинетику возникновения и распространения возмущения в решётке в виде эволюции пространственно-временного распределения кинетической температуры.

Взаимодействие с электронами на масштабе  $\sim 100$  фс не изменяет существенным образом характер корреляций в динамике атомов решётки. Поэтому на каждом шаге моделирования на этих временах в уравнении (1) использовался один и тот же заранее МД-рассчитанный ДСФ, соответствующий начальному состоянию решётки.

Избыточная энергия, передаваемая от электронов ко всем атомам в каждом цилиндрическом слое на каждом шаге моделирования, распределялась в соответствии с массовыми долями атомов разных типов. Затем их скорости увеличивались таким образом, чтобы прирост общей кинетической энергии атомов в слое соответствовал энергии, передаваемой в решётку от релаксирующей электронной подсистемы.

В **четвертой главе** приводятся примеры применения разработанной модели к описанию возбуждения различных материалов (LiF, оливин) в треках БТИ. На примере алюминия было исследовано влияние электронной температуры на реализацию различных предельных случаев скорости электрон-решётчного обмена энергией, определяемых различной динамической корреляцией атомов решётки. LiF и оливин использовались для демонстрации возможного различия в нагреве материалов в треке БТИ.

Для расчёта ДСФ кристаллического Al моделировался NVE ансамбль (постоянное число частиц, объем и энергия), состоящий из 1372 атомов в термодинамическом равновесии при температуре  $T_i=300\text{K}$  ( $7\times 7\times 7$  элементарных ячеек). Каждая элементарная ячейка Al содержит 4 атома и в равновесии имеет размер  $4,060\times 4,060\times 4,060 \text{ \AA}^3$ .

Электрон-решёточный фактор скорости передачи энергии определялся по формуле [2]:

$$g_{e-i} = -\frac{\partial E}{\partial t} \cdot \frac{1}{T_e - T_i}. \quad (3)$$

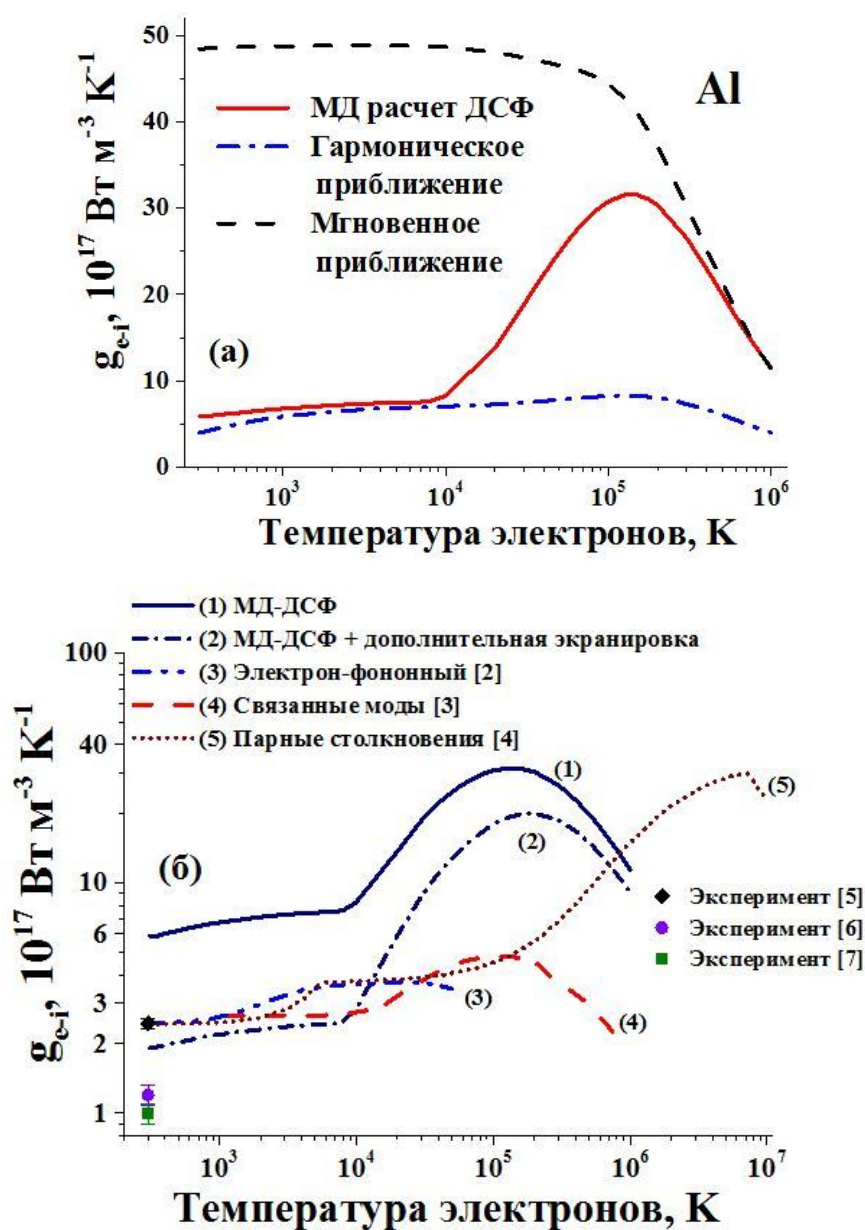
На рис. 3а показаны результаты расчётов с использованием мгновенного и гармонического приближений ДСФ, а также с использованием МД-рассчитанного ДСФ. Для температур электронного ансамбля  $T_e < 1\cdot 10^4 \text{ K}$  характер зависимости рассчитанного  $g_{e-i}$  близок к полученному в гармонической модели ДСФ, а для  $T_e > 3\cdot 10^5 \text{ K}$  эта зависимость близка к мгновенному приближению. В переходной температурной области наблюдается существенное отличие от обоих предельных случаев.

На рис. 3б сравниваются факторы  $g_{e-i}$ , рассчитанные в рамках представляемой модели, для Al с температурой решётки  $T_i=300\text{K}$  с полученными в работах [2-4] и измеренными в экспериментах [5-7].

Результаты применения МД-ДСФ модели, гармонического приближения ДСФ и расчетов работ [2,3] демонстрируют существование в области  $T_e < 1\cdot 10^4 \text{ K}$  «плато», на котором  $g_{e-i}$  – фактор слабо зависит от температуры электронного ансамбля. Величины  $g_{e-i}$  – факторов в работах [2,3] располагаются в этой области немного ниже предсказываемых МД-ДСФ моделью. Это различие возникает из-за того, что МД-ДСФ метод учитывает большее число возможных коллективных мод решетки: оптические и акустические фононы, ангармонические вклады и др.

В работе [2] использовалась подгонка модели под экспериментальный результат [5]. Авторы [4] использовали 3 коэффициента для описания  $g_{e-i}$  – фактора. Следует отметить, что последующие эксперименты [6,7], показали

неоднозначность выбора экспериментальных данных для подгоночной процедуры. Разброс экспериментальных величин в [5-7] на рис. 3б связан с различием в технике экспериментов и параметрах используемых лазерных источников. Кроме того, в экспериментах [5-7] для извлечения величины  $g_{e-i}$  – фактора использовалась двухтемпературная модель термической вспышки, применение которой проблематично для описания релаксации электронного возбуждения в подобных системах [17-19]. Поэтому в представленной работе процедура подгонки не использовалась.



**Рисунок 3.** (а) Рассчитанный электрон-решёточный фактор скорости передачи энергии от электронной в атомную подсистему Al и (б) его сравнение с данными других групп.

Эффект связанных мод (взаимодействие коллективных электронных мод с коллективными атомными модами) может приводить к дополнительной экранировке электрон-решётчного взаимодействия [20].

Кривая (2) на рис. 3б, учитывающая этот эффект путем удвоения квадрата обратной длины экранировки, указывает на то, что дополнительная экранировка смещает изначальную МД-ДСФ кривую (1) в область близкую к экспериментальным точкам. Это означает, что эффект связанных мод может быть важным для электрон-решётчного обмена энергией в треке и требует дальнейших исследований.

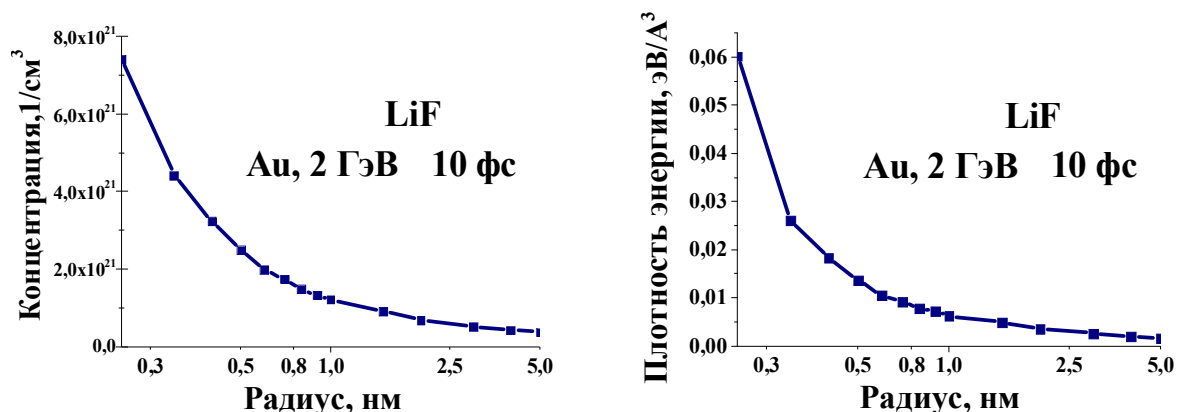
Следует отметить, что в данном расчете предполагалась постоянная концентрация электронов в алюминии. При температурах электронного ансамбля больших 60-70 эВ ( $\approx 10^6$ К) начинается активная ионизация *L*-оболочки атома Al. Это увеличивает концентрацию делокализованных электронов в материале, поэтому, демонстрируя правильный предельный переход к мгновенному приближению, в практических приложениях модели возможные изменения концентрации электронов при больших температурах электронного ансамбля ( $T_e > 10^6$ К) должны быть учтены.

Для исследования возбуждения и нагрева решеток LiF и форстерита ( $Mg_2SiO_4$ ) (семейство оливинов) использовались межатомные потенциалы Tosi-Fumi [21] и из работы [22], соответственно. Элементарные ячейки LiF и  $Mg_2SiO_4$  содержат 8 и 28 атомов и в равновесии имеют размер  $4,072 \times 4,072 \times 4,072 \text{ \AA}^3$  и  $4,75 \times 10,19 \times 5,98 \text{ \AA}^3$ . Для расчёта ДСФ моделировался NVE ансамбль, состоящий из 512 атомов LiF и 504 атомов  $Mg_2SiO_4$  и находящийся в термодинамическом равновесии при температуре  $T=300$ К ( $4 \times 4 \times 4$  элементарные ячейки для LiF и  $3 \times 2 \times 3$  для  $Mg_2SiO_4$ ). Для исследования возбуждения и нагрева решеток моделировалось  $42 \times 42 \times 4$  элементарных ячеек для LiF и  $40 \times 20 \times 5$  для  $Mg_2SiO_4$ .

На рис. 4 представлены использованные начальные данные (радиальные распределения концентрации электронов и плотности их энергии),



полученные в результате МК моделирования пролета иона Au с энергией 2 ГэВ в LiF [18].

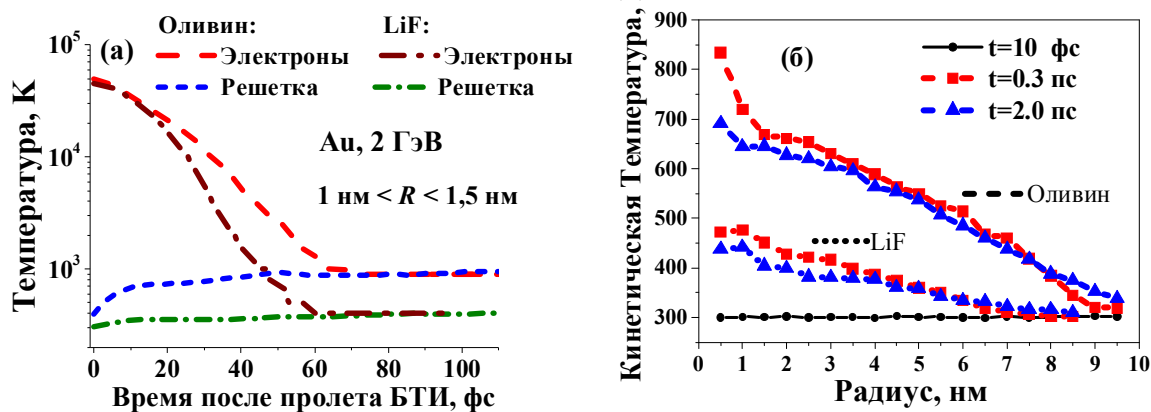


**Рисунок 4.** Радиальное распределение концентрации электронов и плотности их энергии в треке иона Au 2 ГэВ в LiF к моменту окончания ионизационных каскадов (10фс после пролёта иона) [18].

Рис. 5а показывает, что выравнивание электронной и решеточной температур в LiF в цилиндрическом слое  $1 \text{ нм} < R < 1,5 \text{ нм}$  происходит за время  $\sim 60 \text{ фс}$  после пролета иона. То есть обмен энергией между электронной и ионной подсистемами в треке БТИ прекращается на временах, сравнимых с наименьшими временами атомных осцилляций ( $> 50 \text{ фс}$ , оптические фононы). Это указывает на слабую обоснованность применения электрон-фононного механизма для описания этого обмена в треках БТИ, что согласуется с выводами работы [16].

Зависимость радиального распределения кинетической температуры атомов решетки LiF от времени в нанометрической окрестности траектории БТИ представлена на рис. 5б.

Небольшое ( $\Delta T \sim 100 \text{ K}$ ) изменение кинетической температуры решётки LiF вследствие взаимодействия с электронной подсистемой наблюдается лишь на расстояниях меньших 4 нм от траектории БТИ. Это подтверждается результатами эксперимента [8] и не согласуется с выводами модели ТВ [23] о возможном достижении температур плавления-испарения в треках LiF.

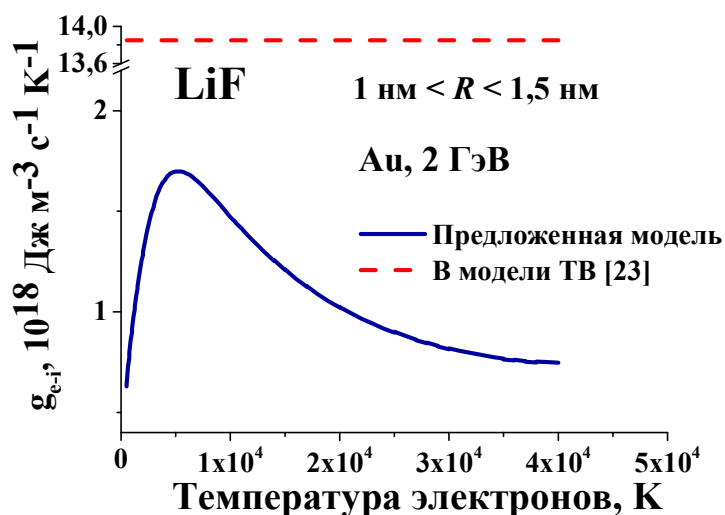


**Рисунок 5.** (а) Зависимости температуры электронов и кинетической температуры атомов LiF и  $\text{Mg}_2\text{SiO}_4$  от времени на расстояниях  $1 \text{ nm} < R < 1,5 \text{ nm}$  от траектории 2 ГэВ Au, (б) радиальное распределение кинетической температуры решётки LiF и  $\text{Mg}_2\text{SiO}_4$  в треке 2 ГэВ Au в различные моменты времени после пролета иона.

Нагрев более отдалённых от центра трека областей происходит за счёт пространственного распространения возбуждения в решётке. Так, температура решетки через 2 пс после пролета иона и расстояниях больших 6 нм превышает значение температуры в этой области ко времени 0.3 пс.

На рис. 6 сравнивается  $g_{e-i}$  – фактор (3), рассчитанный для LiF в рамках предлагаемой модели, с  $g_{e-i}$  – фактором, используемым в работе [23] (модель ТВ с использованием процедуры подгонки).

Видно, что рассчитанный  $g_{e-i}$  – фактор резко зависит от температуры электронов, и его величина на порядок ниже значения  $g_{e-i} = 13,85 \cdot 10^{18} \text{ Дж м}^{-3} \text{ с}^{-1} \text{ К}^{-1}$ , приводимого в работе [23]. Существенно меньшее значение  $g_{e-i}$  – фактора приводит и к меньшему нагреву материала.



**Рисунок 6.** Зависимость  $g_{e-i}$  – фактора от температуры электронов в предлагаемой модели и в модели ТВ [23] (LiF).

Для  $\text{Mg}_2\text{SiO}_4$  использовались начальные данные, полученные из предварительного МК моделирования возбуждения электронной подсистемы [19] после пролета иона Au с энергией 2 ГэВ.

Рис. 5а демонстрирует, что выравнивание электронной и ионной температур в цилиндрическом слое  $1 \text{ нм} < R < 1,5 \text{ нм}$  происходит за время  $\sim 70$  фс. Зависимость радиального распределения кинетической температуры атомов  $\text{Mg}_2\text{SiO}_4$  в треке БТИ от времени представлена на рис. 5б.

Подобно случаю с LiF обмен энергией между электронной и ионной подсистемами форстерита в треке БТИ прекращается на временах, сравнимых с наименьшими временами динамической корреляции атомов в решетке ( $> 50$  фс). Это говорит о проблемах применения электрон-фононного механизма для описания этого обмена в треках БТИ в оливине.

Рис. 5б показывает, что кинетическая температура решетки форстерита в треке БТИ повышается на  $\Delta T \sim 700$  К. Такой уровень температуры держится в центральной области ( $r < 3$  нм) около 2 пс после пролета БТИ, медленно спадая впоследствии. Тем не менее эта температура почти вдвое ниже, чем температура плавления форстерита.

Уровень возбуждения решетки, достигаемый в треке БТИ в форстерите, превышает более чем в 3 раза этот уровень в LiF при тех же параметрах налетающего иона [18]. Это согласуется с тем, что в отличие от LiF в оливине детектируются структурные изменения [9] при превышении электронных потерь энергии БТИ порога в  $18 \text{ МэВ} \cdot \text{см}^2 \cdot \text{мг}^{-1}$  ( $5 \text{ кэВ/нм}$ ) [24]. Однако и в случае форстерита энергии, переданной в решётку при остывании делокализованных электронов, не хватает для стимулирования наблюдаемых структурных изменений.

Таким образом, нагрев решётки широко-щелевых диэлектриков в результате её взаимодействия с релаксирующим ансамблем делокализованных электронов в треках БТИ относительно невелик. Т.е. модели структурных изменений, основанные только на этом эффекте, могут ошибочно описывать кинетику возникновения трека БТИ. В результате проделанной работы наряду с аналитической аргументацией этого вывода (быстрота остывания электронной подсистемы, отсутствие термализации решётки) получено его подтверждение на основе отгестированного расчета, базирующегося на общих фундаментальных предположениях и не использующего подгоночных параметров.

В частности, эти результаты указывают на необходимость учёта кинетики трансформации избыточной энергии дырочной подсистемы [10] при формулировании моделей структурных изменений в треке БТИ.

### **Выводы.**

1. Построена количественная микроскопическая модель возбуждения материалов в наноразмерных треках БТИ, тормозящихся в режиме электронных потерь энергии. Это дает возможность связать модель возбуждения электронной подсистемы налетающим БТИ с моделями структурно-фазовых изменений, стимулированных релаксацией этого возбуждения в окрестности траектории иона, т. е. позволяет разрабатывать количественные модели модификации материалов пучками БТИ.

2. Модель взаимодействия делокализованных электронов и решётки в треке БТИ построена на основе общего микроскопического подхода и не использует подгоночных параметров. Аппарат модели, основанной на формализме ДСФ, позволяет автоматически учитывать различные предельные случаи динамической реакции атомов решётки на вносимое возбуждение и адекватно описывать особенности экстремальной кинетики возбуждения материалов в треках БТИ на характеризующих её субпикосекундных временных и нанометрических пространственных масштабах.

3. В рамках представленной модели реализован и оттестирован численный алгоритм расчета ДСФ и нагрева трека БТИ в различных материалах.

4. Исследована зависимость скорости электрон-решёточного обмена энергией от температуры электронного ансамбля (на примере Al).

5. Определены характерные времена взаимодействия электронной и ионной подсистем в треках БТИ (на примере широкощелевых диэлектриков).

6. Определены пространственно-временные распределения температуры (кинетической) в этих диэлектриках, которые (а) соответствуют экспериментальным результатам и (б) показывают, что достигаемые величины температуры решётки значительно ниже предсказываемых моделью двухтемпературной ТВ.

7. Показано, что энергии, передаваемой решётке от генерируемых в треке делокализованных электронов, не хватает для появления наблюдаемых структурных изменений.

8. Сделан вывод о том, что локальное повышение температуры решётки в результате её взаимодействия с релаксирующим ансамблем делокализованных электронов не является единственным процессом, определяющим кинетику образования трека БТИ. В частности, это указывает на необходимость учёта кинетики трансформации избыточной энергии дырочной подсистемы при описании этих изменений [10].

**СПИСОК ЦИТИРОВАННОЙ ЛИТЕРАТУРЫ**

1. Митерев, А.М. Теоретические представления о формировании и эволюции треков заряженных частиц / А.М. Митерев // Успехи Физических Наук. – 2002. – Т. 172. – № 10. – С. 1131.
2. Lin, Z. Electron-phonon coupling and electron heat capacity of metals under conditions of strong electron-phonon nonequilibrium / Z. Lin, L.V. Zhigilei, V. Celli // Phys. Rev. B. – 2008. – № 77. – P. 075133.
3. Vorberger, J. Theory of electron-ion energy transfer applied to laser ablation / J. Vorberger, D.O. Gerike // International Symposium on High Power Laser Ablation, American Institute of Physics Conference Proceedings. – 2012. – № 1464. – P. 572.
4. Povarnitsyn, M.E. A wide-range model for simulation of pump-probe experiments with metals / M.E. Povarnitsyn, N.E. Andreev, E.M. Apfelbaum et al. // Applied Surface Science. – 2012. – № 258. – P. 9480.
5. Hostetler, J.L. Measurement of the electron-phonon coupling factor dependence on film thickness and grain size in Au, Cr, and Al / J.L. Hostetler, A.N. Smith, D.M. Czajkowsky et al. // Applied Optics. – 1999. – V. 38. – № 16. – P. 3614.
6. Li-Dan, Z. Study on ultra fast nonequilibrium heat transfers in nano metal films by femtosecond laser pump and probe method / Z. Li-Dan, S. Fang-Yuan, Z. Jie et al. // Acta Physica Sinica. – 2012. – V. 61. – № 13 – P. 134402.
7. Ma, W. Study of the Electron–Phonon Relaxation in Thin Metal Films Using Transient Thermoreflectance Technique / W. Ma, H. Wang, X. Zhang et al. // International Journal of Thermophysics (Special Conference Issue: Selected Papers of the Ninth Asian Thermophysical Properties Conference). – 2013. – V. 34. – I. 12. – P. 2400.
8. Schwartz, K. Effect of electronic energy loss and irradiation temperature on color-center creation in LiF and NaCl crystals irradiated with swift heavy ions / K. Schwartz, A.E. Volkov, M.V. Sorokin et al. // Phys. Rev. B. – 2008. – № 78. – P. 024120.

9. Szenes, G. The effect of heavy cosmic-ray ions on silicate grains in the interstellar dust / G. Szenes, V.K. Kovacs, B. Pecz et al. // *The Astrophysical Journal*. – 2010. – № 708. – P. 288.
10. Medvedev, N.A. 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> / N.A. Medvedev, R.A. Rymzhanov, A.E. Volkov // *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B*. – 2013. – № 315. – P. 85.
11. Van Hove, L. Correlations in Space and Time and Born Approximation Scattering in Systems of Interacting Particles / L. Van Hove // *Physical Review*. – 1954. – № 95. – P. 249.
12. Liu, X.Y. Aluminium interatomic potential from density functional theory calculations with improved stacking fault energy / X.Y. Liu, F. Ercolessi, J.B. Adams // *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*. – 2004. – № 12. – P. 665.
13. Rieth, M. *Nano-Engineering in Science and Technology* / M. Rieth. – USA:World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd., 2003.
14. González, D.J. Orbital free ab initio molecular dynamics study of liquid Al near melting / D.J. González, L.E. González, J.M. López et al. // *Journal of Chemical Physics*. – 2001. – № 115. – P. 2373.
15. Scopigno, T. Collective dynamics of liquid aluminum probed by inelastic x-ray scattering / T. Scopigno, U. Balucani, G. Ruocco et al. // *Phys. Rev. E*. – 2000. – № 63. – P. 011210.
16. Volkov, A.E. Heating of metals in swift heavy ion tracks by electron-ion energy exchange / A.E. Volkov, V.A. Borodin // *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B*. – 1998. – № 146. – P. 137.
17. Lipp, V.P. Kinetics of propagation of the lattice excitation in a swift heavy ion track / V.P. Lipp, A.E. Volkov, M.V. Sorokin et al. // *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B*. – 2011. – № 269. – P. 865.

18. Gorbunov, S.A. Combined model of the material excitation and relaxation in swift heavy ion tracks / S.A. Gorbunov, P.N. Terekhin, N.A. Medvedev et al. // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B. – 2013. – № 315. – P. 173.
19. Gorbunov, S.A. Excitation and relaxation of olivine after swift heavy ion impact / S.A. Gorbunov, N.A. Medvedev, R. A. Rymzhanov et al. // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B. – 2014. – № 326. – P. 163.
20. Dharma-wardana, M.W.C. Energy relaxation and the quasiequation of state of a dense two-temperature nonequilibrium plasma / M.W.C. Dharma-wardana, F. Perrot // Phys. Rev. E. – 1998. – Vol. 58. – № 3. – P. 163.
21. Belonoshko, A.B. Molecular dynamics of LiF melting / A.B. Belonoshko, R. Ahuja, B. Johansson // Physical Review B. – 2000. – № 61. – P. 11928.
22. Leinenweber, K. A Transferable Interatomic Potential for Crystalline Phases in the System MgO-SiO<sub>2</sub> / K. Leinenweber, A. Navrotsky // Physics and Chemistry of Minerals. – 1988. – № 15. – P. 588.
23. Toulemonde, M. Transient thermal processes in heavy ion irradiation of crystalline inorganic insulators / M. Toulemonde, Ch. Dufour, A. Meftah et al. // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B. – 2000. – № 166-167. – P. 903.
24. Aleksandrov, A.B. Methods for Image Recognition of Charged Particle Tracks in Track Detector Data Automated Processing [Электронный ресурс] / A.B. Aleksandrov, N.G. Polukhina, N.I. Starkov // Astrophysics. – 2012. – Режим доступа: <http://www.intechopen.com/books/astrophysics/methods-for-image-recognition-of-charged-particle-tracks-in-track-detector-data-automated-processing>

## ОСНОВНЫЕ ПУБЛИКАЦИИ АВТОРА

### Публикации по теме диссертации

1. Gorbunov, S.A. The microscopic model of material excitation in swift heavy ion tracks / S.A. Gorbunov, N.A. Medvedev, **P.N. Terekhin** et al. // Physica Status Solidi C. – 2013. – № 10. – P. 697.



2. Gorbunov, S.A. Combined model of the material excitation and relaxation in swift heavy ion tracks / S.A. Gorbunov, **P.N. Terekhin**, N.A. Medvedev et al. // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B. – 2013. – № 315. – P. 173.
3. Gorbunov, S.A. Excitation and relaxation of olivine after swift heavy ion impact / S.A. Gorbunov, N.A. Medvedev, R.A. Rymzhanov et al. // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B. – 2014. – № 326. – P. 163.

### **Тезисы конференций**

4. **Terekhin, P.N.** DSF based model of lattice excitation at the late stage of relaxation of the electronic subsystem in a swift heavy ion track / **P.N. Terekhin**, S.A. Gorbunov, N.A. Medvedev et al. // 16th International Conference on the Physics of Highly Charged Ions, Heidelberg, Germany, 2-7 September, Book of Abstracts – 2012. – P. 187.
5. Gorbunov, S.A. The microscopic model of material excitation in swift heavy ion tracks / S.A. Gorbunov, **P.N. Terekhin**, R.A. Rymzhanov et al. // European Material Research Society Fall Meeting, Warsaw, Poland, 17 – 21 September, Book of Abstracts – 2012. – P. L-VIII3.
6. Gorbunov, S.A. Microscopic Model of Material Excitation in Swift Heavy Ion Tracks / S.A. Gorbunov, **P.N. Terekhin**, R.A. Rymzhanov et al. // 25th International Conference on Atomic Collisions in Solids, Kyoto, Japan, 21-25 October, Book of Abstracts – 2012. – P. 111.
7. Gorbunov, S.A. Dynamic Structure Factor Based Approach for Electron-Lattice Coupling in Swift Heavy Ion Tracks / S.A. Gorbunov, **P.N. Terekhin**, N.A. Medvedev et al. // 25th International Conference on Atomic Collisions in Solids, Kyoto, Japan, 21-25 October, Book of Abstracts – 2012. – P. 112.
8. Горбунов, С.А. Количественная модель возбуждения материалов в наноразмерных треках быстрых тяжелых ионов, тормозящихся в режиме электронных потерь энергии / С.А. Горбунов, **П.Н. Терехин**, Н.А. Медведев, А.Е. Волков // X Курчатовская молодёжная научная школа, Москва, Россия, 23-26 октября, Сборник аннотаций работ – 2012. – P. 225.

9. Rymzhanov, R.A. Microscopic model of excitation of in swift heavy ion tracks in insulators / R.A. Rymzhanov, A.E. Volkov, **P.N. Terekhin** et al. // 17th International Conference on Radiation Effects in Insulators, Helsinki, Finland, June 30 – July 5, Book of Abstracts – 2013. – P. PA-82.

10. **Терехин, П.Н.** Модель возникновения и релаксации экстремального состояния материалов, возникающего в наноразмерных треках БТИ / **П.Н. Терехин**, А.Е. Волков // XI Курчатовская молодёжная научная школа, Москва, Россия, 12-15 ноября, Сборник аннотаций работ – 2013. – P. 251.