

Естественные и инженерные науки

МУЛЬТИМАСШТАБНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭФФЕКТОВ ОБЛУЧЕНИЯ ДВУХСЛОЙНОЙ СИСТЕМЫ $\text{Al}_2\text{O}_3\text{-AlN}$ БЫСТРЫМИ ТЯЖЕЛЫМИ ИОНАМИ

М.А. Землякова^{1,2,*}, Р.А. Рымжанов^{1,3}, В.А. Скуратов^{1,2,4}

¹ Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия

² Государственный университет «Дубна», Дубна, Россия

³ Институт ядерной физики, Алматы, Казахстан

⁴ Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Москва, Россия

e-mail: zemliakova@jinr.ru

В работе представлены результаты мультимасштабного моделирования радиационных эффектов, возникающих после облучения двухслойной структуры $\text{Al}_2\text{O}_3\text{-AlN}$ быстрыми тяжёлыми ионами (Xe 92 и 920 МэВ).

Был применён комбинированный подход: кинетика электронной подсистемы образца моделировалась с использованием Монте-Карло кода TREKIS [1], а следующая за ней релаксация атомной системы была изучена методами молекулярной динамики (МД). Монте-Карло код TREKIS основан на формализме комплексной диэлектрической функции – динамического структурного фактора, что делает возможным учёт коллективной реакции электронной подсистемы на вносимое возбуждение, необходимый для корректного описания процессов, происходящих в треке после пролёта иона [1]. Одним из наиболее важных типов данных, которые вычисляет TREKIS, является радиальное распределение избыточной энергии решётки в треке иона, из которого рассчитываются начальные скорости атомов для МД-моделирования релаксации атомной системы. Моделирование методами молекулярной динамики осуществлялось с использованием программы GPUMD [2]. Двухслойная структура $\text{Al}_2\text{O}_3\text{-AlN}$ моделировалась с потенциалом машинного обучения типа NEP-ZBL, параметризация которого была взята из работы [3,4].

Перед моделированием облучения ионами Xe 92 и 920 МэВ ячейка $\text{Al}_2\text{O}_3\text{-AlN}$ была выдержана 20 пс при температуре 300 К. Эволюция системы после облучения рассматривалась в течение нескольких сотен пикосекунд, когда модель остывала до комнатной температуры. Было продемонстрировано, что Al_2O_3 обладает меньшей радиационной стойкостью, чем AlN: в нём после охлаждения остаётся заметная повреждённая область, а нитрид алюминия по достижении устойчивого состояния почти полностью рекристаллизуется и имеет только отдельные точечные дефекты (рис. 1).

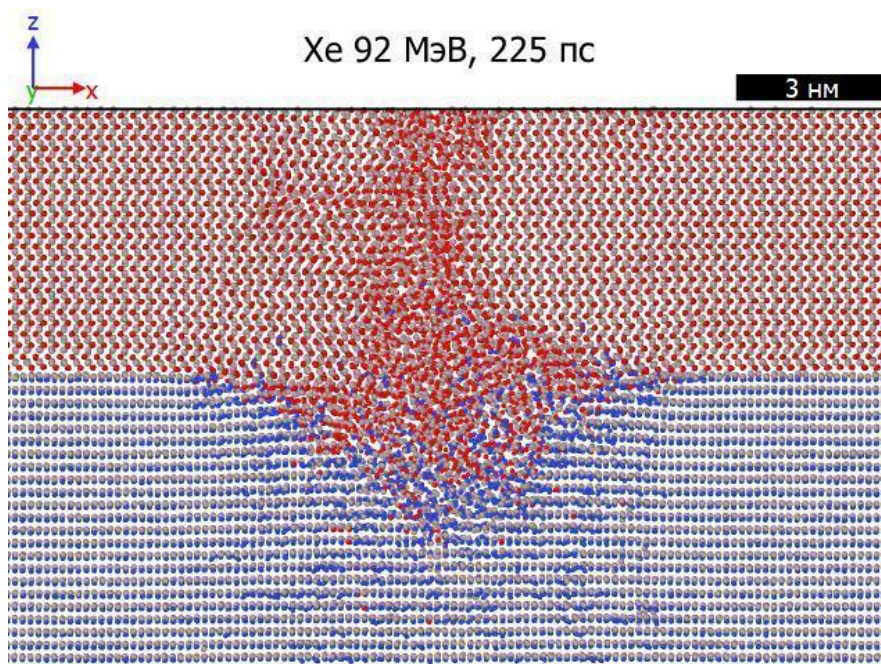


Рисунок 1. Состояние системы после пролёта иона Xe (92 МэВ) в момент времени 225 пс. Красным показаны атомы кислорода, серым – алюминия, синим – азота

Наиболее интересная область – граница между AlN и Al₂O₃. Наблюдается проникновение атомов кислорода из оксида алюминия внутрь слоя AlN на глубину около 5 нм от границы раздела, и, обратно, атомов азота из нитрида алюминия в Al₂O₃ на расстояние порядка 4 нм от интерфейса. Также, слои обмениваются между собой атомами Al.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда №25-72-10101, <https://rscf.ru/project/25-72-10101/>

Работа была выполнена с использованием оборудования центра коллективного пользования «Комплекс моделирования и обработки данных исследовательских установок мега-класса» НИЦ «Курчатовский институт», <http://ckp.nrcki.ru/>.

Литература

1. Medvedev N.A., Rymzhanov R.A., Volkov A.E. Time-resolved electron kinetics in swift heavy ion irradiated solids // Journal Physics D: Applied Physics. 2015. 48. - P. 355303
2. Fan Z., Chen W., Vierimaa V., Harju A. Efficient molecular dynamics simulations with many-body potentials on graphics processing units // Comput. Phys. Commun. 2017. 218. – Pp. 10-16.
3. Liu J., Byggmästar J., Fan Z., Quian P., Su Y. Large-scale machine-learning molecular dynamics simulation of primary radiation damage in tungsten // Physical Review B. 2023. 108. - P. 054312.
4. https://github.com/Jonsnow-willow/GPUMD-Wizard/tree/main/tutorials/Molecular_Dynamics/potentials/nep89_20250409.txt