

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Физический институт им. П. Н. Лебедева
Российской академии наук

на правах рукописи

Волков Александр Евгеньевич

**МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРУКТУРНО-ФАЗОВЫХ ИЗМЕНЕНИЙ,
ИНИЦИИРОВАННЫХ РЕЛАКСАЦИЕЙ ЭКСТРЕМАЛЬНОГО
ВОЗБУЖДЕНИЯ ЭЛЕКТРОННОЙ ПОДСИСТЕМЫ ДИЭЛЕКТРИКОВ В
ТРЕКАХ БЫСТРЫХ ТЯЖЁЛЫХ ИОНОВ**

(1.3.3 – Теоретическая физика)

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание учёной степени
доктора физико-математических наук

Москва - 2024

Работа выполнена в Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Физическом институте им. П. Н. Лебедева Российской Академии Наук (ФИАН)

Официальные оппоненты

Бондаренко Геннадий Германович, доктор физико-математических наук, Московский государственный институт электроники и математики Национального исследовательского университета «Высшая школа экономики», профессор

Сорокин Павел Борисович, доктор физико-математических наук, Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС», ведущий научный сотрудник, доцент

Чеченин Николай Гаврилович, доктор физико-математических наук, Научно-исследовательский институт ядерной физики имени Д.В. Скобельцына Московского Государственного Университета имени М.В. Ломоносова, заведующий отделом, профессор

Ведущая организация Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ».

Защита диссертации состоится «28» октября 2024 г. в 12 часов на заседании диссертационного совета 24.1.262.04 при Физическом институте им. П. Н. Лебедева РАН: 119991, г. Москва, Ленинский проспект, д. 53.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ФИАН и на сайте www.lebedev.ru.

Автореферат разослан «__» _____ 20__ г.

Учёный секретарь диссертационного совета,
кандидат физико-математических наук

Чернышов Д.О.

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы исследования Быстрые тяжёлые ионы (БТИ, масса $M > 20m_p$, где m_p масса протона, энергия $0,1 \text{ МэВ/нукл} < E < 10 \text{ МэВ/нукл}$) теряют энергию в конденсированной среде возбуждая электронную подсистему мишени [1]. Максимум электронных потерь (Брегговский пик) достигается при скорости иона, примерно равной скорости атомных электронов. Для наиболее тяжёлых ионов (Au, Bi, U) эти потери достигают значений 40-50 кэВ на нанометр траектории.

Радиационные повреждения является одной из основных проблем, связанных с БТИ [2,3]. Длительное воздействие этими ионами может привести к макроскопическим повреждениям материалов, что необходимо учитывать при применении ядерных материалов и обращении с ядерными отходами [4]. Облучение этими ионами может вызывать повреждение ДНК вплоть до летальной дозы [5,6]. Космические лучи представляют опасность для космических полётов [7,8]. Прохождение БТИ приводит к программным сбоям и повреждению элементов в вычислительной технике [9].

С другой стороны, контролируемое использование БТИ открыло возможности модификации материалов с наноразмерной точностью. Химическое травление треков БТИ в полимерах применяется для изготовления фильтрующих мембран [10,11]. БТИ позволяют создавать наноразмерные области с изменёнными электронными свойствами, что является способом конструирования ансамблей квантовых точек в нанoeлектронике [12,13]. Пучки БТИ могут контролировано повреждать неоперабельные раковые опухоли, например, внутри мозга пациента [14,15].

Все эти задачи обеспечивают, начиная с 50-х годов прошлого века, неуклонный рост интереса к проблемам облучения различных материалов быстрыми тяжёлыми ионами [2,3]. Экспериментальная и теоретическая активность по этой тематике резко возросла в 1990-х годах, когда развитие экспериментальных методик дало толчок к развитию нанотехнологий на основе облучения БТИ [2,3].

Представленная работа направлена на решение актуальной проблемы, связанной с недостатком фундаментального знания о воздействии БТИ на конденсированные среды [2]. Неполнота этого знания тормозит построение физической основы технологических процессов контролируемого объёмного наноструктурирования мишеней пучками БТИ, разработку материалов, радиационно-стойких к этому виду облучения, разработку методик модификации генетического материала.

В связи с очень высокой стоимостью экспериментального оборудования и острым дефицитом пучкового времени на небольшом количестве подходящих ускорителей, для получения значимых результатов требуется максимально подробная проработка идеи эксперимента, его стратегии и методики задолго до начала сеансов облучения. Это трудно сделать без использования имеющей предсказательную силу и пригодной для большинства исследуемых материалов модели, в едином подходе описывающей взаимосвязанные процессы, реализуемые в треке БТИ [16].

Экстремальность начального возбуждения и невозможность использования привычных макроскопических моделей на ультракоротких временных (до 1пс) и малых пространственных (~10нм) размерах трека БТИ, желание изучить пределы применимости этих моделей и построить адекватный явлению аппарат, формирует **фундаментальную актуальность представленной работы.**

Цели и задачи работы

Главными целями работы являлись (а) построение и тестирование фундаментально обоснованной мультимасштабной микроскопической модели, в едином подходе количественно описывающей, как кинетику возбуждения электронной и атомной подсистем в треке БТИ, так и вызываемую релаксацией этого возбуждения кинетику структурно-фазовых изменений в нанометрической окрестности траектории иона в диэлектриках. (б) выделение на основании применения модели механизмов и процессов, управляющих кинетикой формирования треков БТИ в диэлектриках.

Для достижения этих целей решались следующие задачи:

1. Построение Монте—Карло (МК) модели, описывающей возбуждение электронной и ионной подсистем материалов налетающим БТИ и генерируемыми вблизи траектории иона быстрыми электронами. Определение сечений взаимодействия возбуждённых электронов и валентных дырок с электронной и атомной подсистемами мишени, учитывающих коллективную реакцию этих подсистем на вносимое возбуждение.

2. Выделение и описание механизмов, определяющих передачу энергии от возбуждённой электронной в атомную подсистему материала на фемтосекундных временах существования экстремально возбуждённого состояния электронной подсистемы в треке БТИ.

3. Определение пространственно-временных распределений переданных атомной решётке энергии и импульса, формирующих начальные условия для молекулярно-динамического (МД) моделирования реакции атомного ансамбля мишени на вносимое возбуждение.

4. МД моделирование реакции атомной подсистемы на вносимое возбуждение в наноразмерной окрестности траектории (треке) БТИ.

5. Практическое применение построенной мультимасштабной модели к описанию формирования структурно-изменённых треков БТИ в материалах, представляющих экспериментальный интерес (Al_2O_3 , MgO , LiF , CaF_2 , Y_2O_3 , $\text{Y}_3\text{Al}_5\text{O}_{12}$ (YAG), SiO_2 , оливин $((\text{Mg}_x\text{Fe}_{1-x})_2\text{SiO}_4)$) на возбуждение, вносимое налетающим БТИ.

6. Сравнение результатов моделирования с экспериментальными результатами и выделение механизмов, управляющих кинетикой возбуждения и релаксации трековых областей в этих материалах.

7. Моделирование особенностей структурных повреждений различных диэлектриков при их облучении пучками БТИ с высокими флюенсами.

8. Применение полученного знания для решения фундаментальных и прикладных задач, связанных с ультрабыстрым экстремальным возбуждением электронной подсистемы материалов.

Основные положения, выносимые на защиту:

1. Разработана мультимасштабная гибридная модель, количественно и без использования подгоночных параметров описывающая (а) возникновение и пространственное распространение электронного возбуждения, сопровождаемого передачей энергии в ионную подсистему диэлектриков (Монте-Карло модель TREKIS-3), и (б) последующую реакцию атомной решётки на вносимое возбуждение (молекулярная динамика) в нанометрической окрестности траекторий БТИ, тормозящихся в режиме электронных потерь энергии.

2. Выделен механизм нетермического ускорения атомов, инициированного резким изменением межатомного потенциала в результате фемтосекундного экстремального возбуждения электронной подсистемы диэлектриков в треке БТИ.

3. Обнаружен нетермический коллапс запрещённой зоны диэлектриков в треках БТИ. Основываясь на этом эффекте, построена модель конвертации неравновесной потенциальной энергии электрон-дырочных пар в кинетическую энергию атомов.

4. Обнаружено нетермическое возникновение суперионного состояния оксида алюминия с проводящими, полупроводниковыми и диэлектрическими электронными свойствами, инициированное экстремальным возбуждением электронной подсистемы материала.

5. Получены пространственно-временные распределения плотности и плотности энергии генерируемых электронов и валентных дырок, дырок на

глубоких оболочках, а также плотности энергии, переданной в ионную подсистему диэлектриков (Al_2O_3 , YAG, MgO, оливин) в нанометрической окрестности траекторий БТИ. Проведён анализ механизмов, управляющих формированием этих распределений.

6. Определены характер и пространственные распределения и структурных изменений, возникающих в диэлектриках (Al_2O_3 , YAG, MgO, оливин) в нанометрической окрестности траекторий различных БТИ. Проведён анализ механизмов, управляющих кинетикой возникновения этих повреждений и их последующей эволюцией/релаксацией при остывании изолированных и перекрывающихся треков БТИ.

7. Получен профиль структурных изменений в диэлектрике вдоль всей траектории пролетевшего БТИ (на примере треков ионов Xe и U в оливине). Обнаружены: (а) несовпадение на траектории иона положений бегового пика электронных потерь энергии иона и области максимальных повреждений, (б) различные пороговые значения этих потерь, необходимые для образования наблюдаемых треков ионов, реализующих левое и правое плечо бегового пика.

8. Построено, с использованием модельного вида Ричи-Хауи функции потерь, аналитическое выражение сечения рассеяния релятивистских заряженных частиц, позволяющее значительно сократить время Монте-Карло моделирования эволюции электронного возбуждения и обмена энергией между электронной и ионной подсистемами в треках БТИ.

9. Разработана, модель химической активации и жидкостного травления трековой области в оливине. Произведена верификация и калибровка экспериментальной методики регистрирования спектра сверхтяжёлых ядер в составе галактических космических лучей, основанной на травлении треков этих ядер в метеоритном оливине.

Научная новизна работы, достоверность и личный вклад автора:

Достоверность разработанной модели и полученных на её основе результатов была многократно подтверждена экспериментальными исследованиями. При этом, результаты моделирования часто формировали цели экспериментов и обосновывали методику их успешного достижения. Требуемая экспериментом предсказательная способность модели, была обеспечена адекватной постановкой задач, построением представленных моделей и анализом полученных результатов на основе наиболее общих фундаментальных принципов. В расчётах использовались хорошо обоснованные и проработанные методы (Монте-Карло, молекулярная динамика, *ab-initio*) и численные алгоритмы. Всё это позволило

избежать использование в модели подгоночных параметров и добиться достоверности результатов моделирования.

Новизна и оригинальность постановки задачи и полученных достоверных результатов обеспечили существенное продвижение, как в выявлении, анализе и понимании фундаментальных механизмов, управляющих быстропротекающей неравновесной кинетикой формирования структурно-изменённых треков БТИ в диэлектриках, так и в разработке аппарата, способного количественно описывать эту кинетику. Разработанная модель активно используется при формулировании задач, постановке и анализе экспериментов различных российских и зарубежных групп, исследующих реакцию материалов на фемтосекундное экстремальное возбуждение их электронной подсистемы. Это обеспечивает дальнейшее постоянное и быстрое развитие представленных в диссертации результатов, моделей и идей. Интерес сообщества к представленным исследованиям подтверждается и тем, что результаты работы многократно представлялись в приглашённых докладах на профильных международных конференциях и публиковались в ведущих международных журналах высокого рейтинга. Эти статьи активно цитируются.

Представленные в диссертации результаты получены лично автором или при его непосредственном участии и руководстве. Деятельность автора включала в себя критический анализ проблем, определение и формулирование целей исследований, постановка и аналитическая проработка всех задач, анализ аналитических, численных и экспериментальных результатов.

Практическая и научная значимость работы Разработанная модель и получаемые на её основе данные впервые позволяют до проведения эксперимента делать количественные оценки результатов и эффективности предлагаемых путей реализации поставленных в эксперименте целей и задач. В условиях постоянного острого дефицита пучкового времени, это резко сокращает время проведения и повышает научную значимость чрезвычайно дорогих экспериментальных исследований.

Результаты работы могут быть применены при оценке радиационной стойкости существующих и разрабатываемых материалов, используемых в атомной энергетике, в космических и биологических технологиях, а также в технологиях радиационного наноструктурирования объёмных мишеней.

С фундаментальной точки зрения, впервые разработана модель, которая на всей пространственно-временной шкале явления даёт без использования подгоночных процедур микроскопическую количественную информацию о

кинетики возбуждения и релаксации трека БТИ, а также структурных изменений в нём.

Наряду с построением оригинальной МК модели возбуждения электронной и ионной подсистемы диэлектриков в треке БТИ, была отлажена методика восстановления функции потерь заряженной частицы из оптических данных. Получено аналитическое выражение для сечений рассеяния релятивистских частиц, что позволило на два порядка сократить время Монте-Карло моделирования возбуждения электронной подсистемы сверхбыстрыми частицами. Обоснован и изучен, связанный с резким изменением межатомного потенциала, инициированный фемтосекундным экстремальным возбуждением электронной подсистемы, нетермический механизм передачи энергии в ионную подсистему, отличный от механизма, основанного на рассеянии электронов и валентных дырок на атомной решётке. Показаны связанные с этим механизмом возможности возникновения суперионного состояния в диэлектриках и изменения их электронной структуры, вплоть до схлопывания запрещённой зоны. Результаты по нетермическому механизму возбуждения атомной подсистемы в треке БТИ были признаны научным советом РАН по радиационной физике твёрдого тела одним из важнейших научных результатов 2022 года. Построена и оттестирована модель жидкостного травления треков БТИ в оливине.

Фундаментальное знание, полученное в результате выполнения диссертации, может быть использовано для решения широкого спектра задач, связанных с ультрабыстрым экстремальным возбуждением электронной системы конденсированных тел (например, с помощью фемтосекундных рентгеновских лазеров на свободных электронах)

Методология и методы исследования В работе использовались современные аналитические и численные методы теории конденсированного состояния, статистической и квантовой механики, физической кинетики. Теория активированного комплекса и методы химической кинетики применялись для описания химической активации материала.

Моделирование возбуждения электронной и ионной подсистемы диэлектриков проводилось с использованием методов Монте-Карло (код TREKIS-3). Для моделирования реакции атомной подсистемы на внесённое возбуждение использовались методы и аппарат молекулярной динамики (код LAMMPS). Эффекты, связанные с изменением атомной потенциальной поверхности в результате сильного электронного возбуждения, исследовались объединением молекулярной динамики с *ab-initio* методами теории функционала плотности (код Quantum Espresso), а также с методом сильной связи (код XTANT-3). Расчёты

проводились на компьютерных кластерах НИЦ Курчатовский Институт (Москва), GSI (Дармштадт, Германия) и ОИЯИ (Дубна).

Апробация работы Начиная с середины 90-х годов результаты работ докладывались на всех профильных международных конференциях: Swift Heavy Ions in Matter (SHIM 1995 Caen, 1998 Berlin, 2002 Taormina, 2005 Aschaffenburg, 2008 Lion, SHIM-ICACS, 2012 Kyoto, 2015 Versailles, , 2018 Caen, SHIM-ICACS 2022 Helsinki), Radiation Effects in Insulators (REI 2007 Caen, 2009 Padova, 2011 Beijing, 2013 Helsinki, 2017 Versailles, 2019 Astana), International Conference Atomic Collisions in Solids (ICACS 2001 Paris, 2006 Berlin, 2010 Krakow, 2013 Lanzhou, 2014 Debrecen), Highly Charged Ions (HCI 2002 Caen, 2012 Heidelberg, 2014 San Carlos,), International Conference of Fusion Reactor Materials (ISFRM 2001 Baden-Baden), Nanostructures for Electronic and Optics (NEOP 2002 Rossendorf), International Conference on Computer Simulations of Radiation Defects in Solids (COSIRES 2016 Loughborough, 2018 Shanghai), International Workshop on Ion Track Technology (EuNITT 2004 Uppsala), конференции European Materials Research Society (E-MRS 2004 Darmstadt, 2006 Nice), Ion Beams in Materials Engineering and Characterizations (IBMEC 2022 New-Delhi), International Conference Ion-Surface Interactions (ICI 2021 Ярославль), 8th International Congress on Energy Fluxes and Radiation Effects (EFRE2022 Томск) и др.

Результаты обсуждались на научных семинарах в НИЦ Курчатовский Институт, Физическом Институте РАН, Объединённом Институте Ядерных Исследований, Институте Теоретической и Экспериментальной Физики, Объединённом Институте Высоких Температур РАН, Московском Инженерно-физическом Институте, Московском Государственном Университете, Московском Физико-Техническом Институту, Московском Институте Стали и Сплавов, и др.

Публикации автора Диссертация аккумулирует работы выполненные в период с 1995 по 2023 гг. в ФИАН им. П.Н.Лебедева, НИЦ Курчатовский Институт и ОИЯИ. В работу вошли материалы 83 статей, опубликованных в рецензируемых журналах, индексируемых в системе Web of Science, и рекомендованных ВАК Минобрнауки РФ. Полный список этих статей приведён в конце автореферата.

Структура и объем работы Диссертация состоит из введения, пяти глав, заключения и списка цитируемой литературы. Работа изложена на 255 страницах и содержит 11 таблиц. Список цитированной литературы включает 400 наименований. Полученные результаты иллюстрируются 100 рисунками. На использование всех графических материалов, отображающих результаты совместных исследований получено разрешение соавторов.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ ДИССЕРТАЦИИ

Во введении приведён краткий обзор и анализ эффектов и проблем облучения материалов пучками быстрых тяжёлых ионов (БТИ), тормозящихся в режиме электронных потерь энергии. Обоснована актуальность работы, и сформулированы её цель, задачи и основные положения, выносимые на защиту. Обоснована методика исследования мультимасштабной кинетики треков БТИ. Указаны научная новизна, фундаментальная и практическая значимость полученных результатов. Продемонстрирована достоверность этих результатов и их апробация в публикациях и докладах на конференциях.

В первой главе приведён обзор и анализ аналитических и численных моделей, предложенных ранее и используемых в настоящее время для изучения воздействия на материалы быстрых тяжёлых ионов, тормозящихся в режиме электронных потерь энергии.

Делается вывод о том, что существующие модели возбуждения трековой области и структурных изменений в ней (например, [17–22]) основаны в основном на макроскопических подходах и не учитывают физические процессы, являющиеся критическими для экстремального возбуждения и ультракоротких пространственно-временных масштабов, характерных для кинетики трека. Все эти модели построены на априорном выделении одной группы процессов и, используя подгоночные процедуры, с недостаточной степенью точности описывают лишь отдельные этапы формирования треков.

Приводятся аргументы о необходимости построения микроскопической количественной модели, которая без использования подгоночных параметров могла бы выделять механизмы, управляющие формированием треков БТИ. Подобная модель значительно повышает эффективность и снижает стоимость поисковых экспериментов, а также разработки технологических процессов на основе облучения материалов пучками БТИ.

Построение и тестирование подобной модели формирования структурно-изменённых треков БТИ в диэлектриках, её тестирование и применение к решению экспериментальных и технологических задач декларируется, как основная цель диссертационной работы.

В конце главы обосновывается мотивация выбора методов исследования и формулируются задачи, решаемые в представленной работе.

Во второй главе, принимая во внимание характерные времена вовлечённых процессов, обосновывается возможность построения мультимасштабной гибридной модели формирования треков БТИ.

Основываясь на возможности разделения динамики электронной и атомной подсистем, предлагается структура модели [23,24], которая в едином подходе описывает (а) возбуждение электронной системы мишени и (б) диссипацию избыточной электронной энергии из-за пространственного распространения возбуждения; (в) возбуждение ионной подсистемы в результате передачи энергии от релаксирующей электронной подсистемы; (г) пространственное распространение возбуждения в атомной системе и (д) первичные структурные изменения в наноразмерной окрестности траектории иона, вызываемые релаксацией этого возбуждения; (е) возможную релаксацию структурных изменений при остывании ионной подсистемы и/или взаимодействия соседних треков.

В первой части главы представляется разработанная Монте-Карло (МК) модель (TREKIS-3) [16,23,25] возбуждения электронной подсистемы материала, распространения этого возбуждения и передачи части избыточной электронной энергии в атомную подсистему. Модель описывает эти процессы как эффекты распространения и рассеяния ансамбля вовлечённых быстрых заряженных частиц: БТИ, генерируемых в результате ионизации электронов и дырок. При моделировании используется МК метод асимптотических траекторий и метод парных соударений.

Модель учитывает: (а) ионизацию атомов мишени налетающим БТИ; (б) разлёт образовавшихся первичных электронов и их упругое и неупругое взаимодействие со средой, (в) кинетику всех возникающих вторичных поколений электронов; (г) пространственное перераспределение образующихся валентных дырок и их упругое и неупругое взаимодействие со средой; (в) релаксацию дырок, появляющихся в результате ионизации глубоких атомных оболочек (межатомные Оже-процессы и радиационные распады); (г) распространение образующихся фотонов и фотоионизацию мишени; (д) возникновение и распад плазмонов.

Основу модели составляют сечения рассеяния налетающего иона, электронов и валентных дырок на электронном и ионном ансамблях мишени. В первом порядке по теории возмущений эти сечения выражаются в виде произведения сечения рассеяния на изолированной частице-рассеивателе и динамического структурного фактора (ДСФ), учитывающего пространственно-временные корреляции в динамике и структуре ансамбля рассеивателей [26]. Флуктуационно-диссипативная теорема связывает ДСФ с комплексной диэлектрической функцией (КДФ) ансамбля заряженных частиц [27,28] и сечения рассеяния принимают вид:

$$\frac{d^2\sigma}{d(\hbar\omega)d(\hbar q)} = \frac{2[Z_{eff}(v)Z_t(v)]^2 e^2}{n_e \hbar^2 \pi v^2} \frac{1}{\hbar q} \frac{1}{\left(1 - e^{-\frac{\hbar\omega}{k_b T}}\right)} \text{Im} \left[\frac{-1}{\varepsilon(q, \omega)} \right] \quad (1)$$

где $Z_{eff}(v, q)$ – эффективный заряд частицы, проходящей через вещество, в зависимости от её скорости v и импульса $\hbar q$ переданного этой частицей системе рассеивателей. Для налетающего электрона $Z_{eff} = 1$, для БТИ эффективный заряд вычисляется по формуле Баркаса [29], Z_t – заряд рассеивающего центра (электроны или атомы мишени), \hbar – постоянная Планка, e – заряд электрона, n_e – концентрация электронов рассеивающей среды, k_b – постоянная Больцмана, T – температура системы рассеивателей. Предполагается, что эта система находится в локальном тепловом равновесии.

Таким образом, проблема построения сечений редуцируется к проблеме построения функции энергетических потерь $\text{Im} \left[\frac{-1}{\varepsilon(q, \omega)} \right]$ (ФЭП) мишени. В работе применялся алгоритм Ричи и Хауи [30] для построения аналитической аппроксимации этой функции в виде суммы осцилляторных функций с использованием экспериментальных данных по фотопоглощению. Для нерелятивистской ФЭП выражение имеет вид:

$$\text{Im} \left[\frac{-1}{\varepsilon(\omega, q = 0)} \right] = \sum_{i=1}^{N_{osc}} \frac{A_i \gamma_i \hbar \omega}{\left(\hbar^2 \omega^2 - \left(E_{0i} + \frac{\hbar^2 q^2}{2M} \right)^2 + (\gamma_i \hbar \omega)^2 \right)^2} \quad (2)$$

Где N_{osc} – число осцилляторов, E_{0i} определяют позиции осцилляторов, A_i – относительные вклады этих осцилляторов, γ_i – ширина осциллятора. $M = m_e$ в случае рассеяния на электронной подсистеме, $M = m_{at}$ в случае рассеяния на ионной подсистеме (усредненная масса атомов материала для случая рассеяния на атомной подсистеме). В случае налетающего электрона, в работе [30] отмечается, что данная модель очень хорошо работает при энергиях электронов >100 эВ и в пределе нулевой переданной энергии ($\hbar\omega \rightarrow 0$). Рисунок 1 представляет восстановленную ФЭП Al_2O_3 .

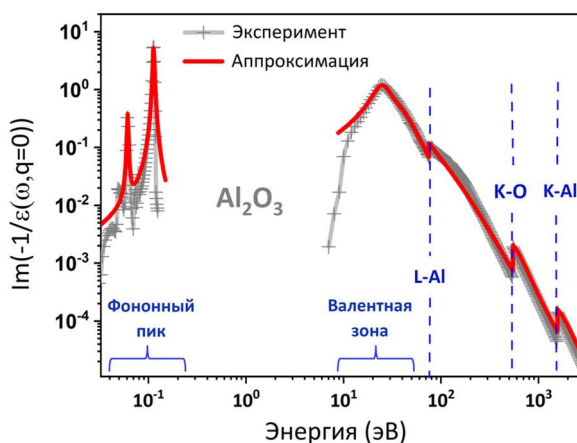


Рисунок 1 Функция потерь Al_2O_3 , восстановленная из экспериментальных данных и её аппроксимация в форме Ричи и Хауи [30].

Для проверки построенных ФЭП использовались экспериментальные данные и сравнение расчётов длин пробега ($\lambda=(n\sigma)^{-1}$, где n -плотность системы рассеивателей, и ионизационных потерь ионов с результатами применения широко используемых программ SRIM и CasP и базы данных NIST [25,31].

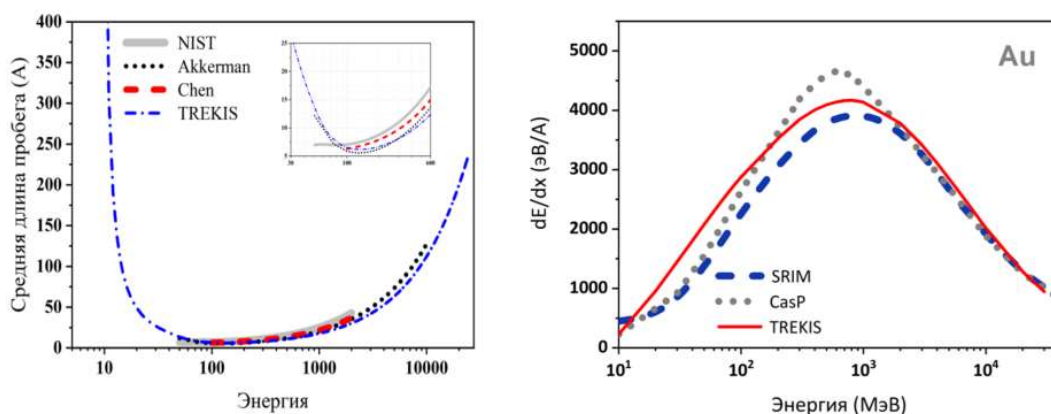


Рисунок 2 [32] демонстрирует рассчитанные в TREKIS длины свободного пробега электронов до неупругого столкновения (ионизации) в Al_2O_3 и электронные потери энергии в Al_2O_3 ионов Au.

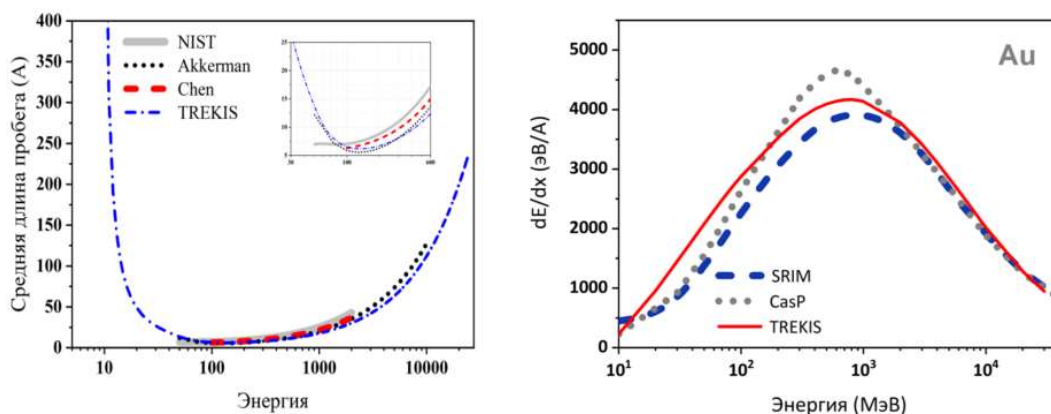


Рисунок 2. – Слева: средние длины свободного пробега электронов до неупругого столкновения (ионизации) в Al_2O_3 . Для сравнения приведены данные из базы NIST [33] и расчётов по представленной в NIST формуле [34]. Справа:

рассчитанные в TREKIS электронные потери энергии в Al_2O_3 ионов Au в сравнении с результатами расчётов SRIM [35] и CasP [36,37]

Проведённые расчёты позволили выделить и уточнить эффекты различных Оже процессов и различных механизмов ионизации глубоких атомных оболочек на кинетику возбуждённого электронного ансамбля в треке БТИ [25,31].

Рисунок 3 [38] иллюстрирует пространственное распространение фронта возбуждения, формируемого быстрыми (дельта-) электронами, возникшими в результате ионизации материала ионом, и электронами, появляющимися в результате фотоионизации фотонами, рождаемыми при рекомбинации дырок на глубоких атомных оболочках [25]. Распространение этого фронта не может быть описано параболическим уравнением теплопроводности.

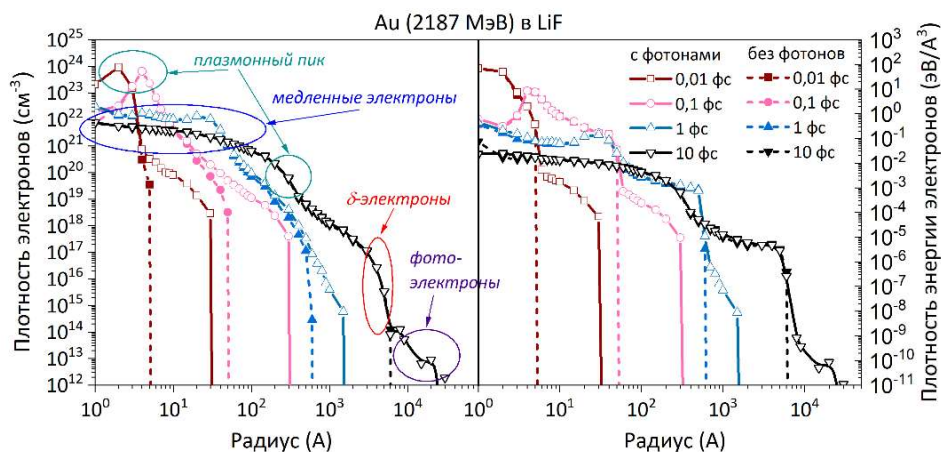


Рисунок 3 - Радиальные распределения электронов, рассчитанные без учёта радиационных распадов глубоких дырок и с учётом этих распадов и переноса фотонов после прохождения 2187 МэВ Au в LiF [25]

Из рисунка видно, что уже на временах, порядка 1 фс после пролёта иона, формируется бимодальное распределение возбуждённых электронов, состоящее из низкоэнергетичных (10-100 эВ) термализованных электронов и небольшого количества электронов высоких энергий на периферии трека.

Рисунок 4 демонстрирует способность TREKIS описывать кинетику дырочного ансамбля, возникающего в результате ионизации материала налетающим БТИ и разлетающимися электронами

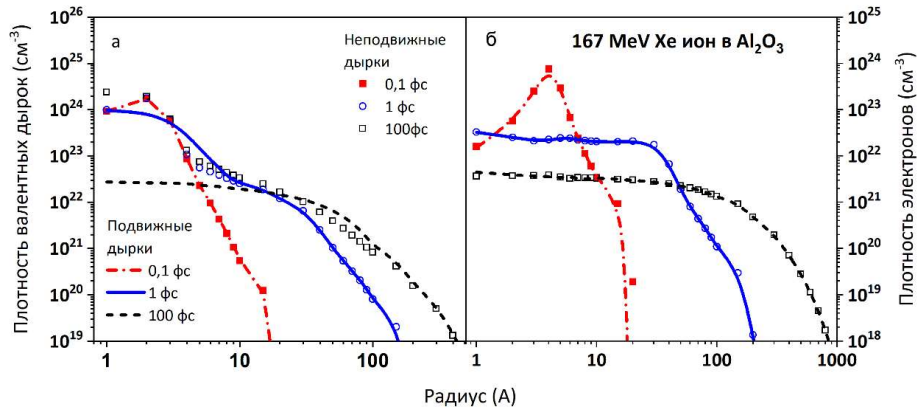


Рисунок 4 – Радиальные распределения (слева) плотности валентных дырок и (справа) выбитых электронов в треке иона Хе 167 МэВ в Al_2O_3 [39]

В релятивистском случае численное интегрирование ФЭП в форме Ричи-Хауи по всей очень большой области возможной передачи энергии и импульса становится очень требовательным ко времени вычислений, чтобы использовать его в эффективном МК коде. Для решения проблемы была построена аналитически решаемая модель релятивистского сечения [40,41], которая предполагает единый подход для любых заряженных частиц и не использует деления столкновений на близкие и далёкие. Было использовано то, что для быстрых частиц ширина осциллятора Ричи-Хауи намного меньше максимальной передаваемой энергии и импульса ($\gamma \ll W, Q$). Это позволяет резко сузить область интегрирования и сократить время расчётов, что делает возможным использование этих сечений в работоспособном Монте-Карло коде. Построенную ФЭП [40,41] можно использовать в интервале энергий налетающих частиц от реализующих Брегговской пик электронных потерь энергии до инициирующих начало тормозного излучения.

Рисунок 5 демонстрирует хорошее согласие неупругих сечений электронов и позитронов и соответствующих длин свободного пробега в алюминии, рассчитанные с использованием релятивистской ФЭП, в нерелятивистском и релятивистском диапазонах энергий со стандартными моделями, такими как PENELOPE [3] и эмпирическим атомным сечением RBEV [29].

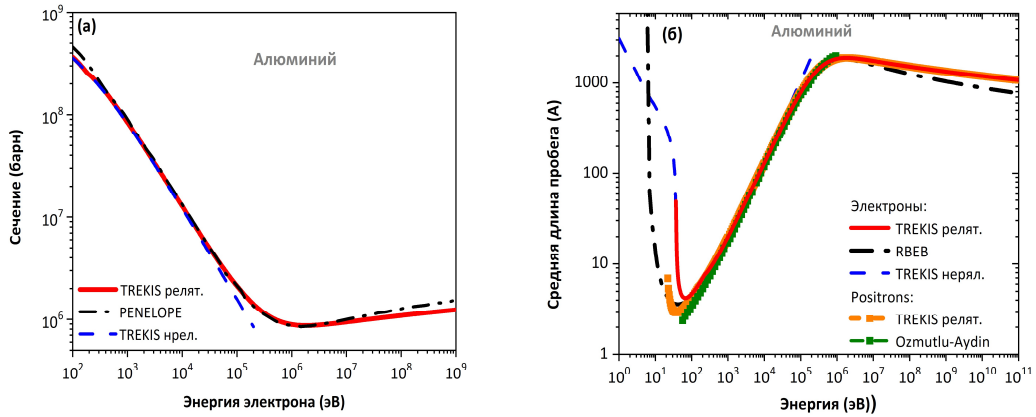


Рисунок 5 - (а) Сечения неупругого рассеяния электронов в твёрдом алюминии, рассчитанные с использованием релятивистской ФЭП, в сравнении с результатами PENELOPE [3] и нерелятивистскими расчётами TREKIS [6]. (б) Соответствующие длины свободного пробега для электронов и позитронов сравниваются с рассчитанными с использованием эмпирических атомных сечений RBEV для электронов [29], и результатами из [29] и [48] для позитронов

В третьей главе диссертации на основании полученных результатов анализируется кинетика обмена энергией между релаксирующей электронной и ионной подсистемами диэлектриков. Указывается, что быстрое остывание электронной подсистемы (~50-100 фс) требует для производства наблюдаемых структурных изменений экстремально высокой скорости передачи энергии в решётку.

Оказалось, что при учёте только энергии, переданной в результате рассеяния горячих электронов, нагрев атомной подсистемы диэлектриков не превышает значений, инициирующих фазовые переходы [42–44]. Этот вывод подтверждается сравнением скоростей передачи энергии в ионную подсистему в треках БТИ в различных диэлектриках, рассчитанных только с учётом механизма рассеяния, с величинами этих параметров, полученных подгонкой результатов применения модели термической вспышки к наблюдаемым радиусам треков [45] (см. Рисунок б). Отмечается, что рассчитанные значения соответствуют результатам измерений в лазерных экспериментах [45].

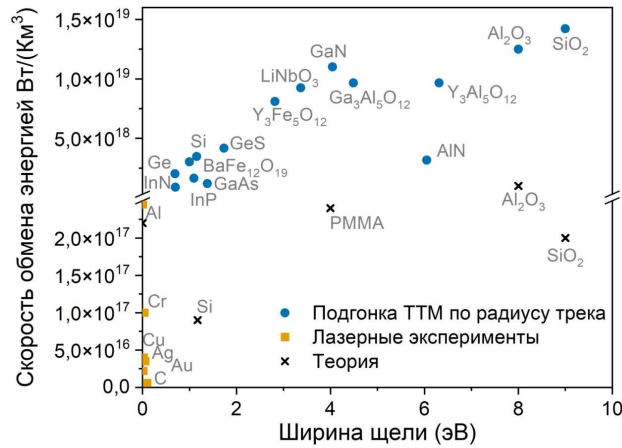


Рисунок 6 - Скорости электрон-решётчного обмена энергией в треках БТИ.

Кружками указаны подогнанные параметры электрон-решётчного взаимодействия, извлечённые из данных облучения БТИ [22] различных материалов. Квадратами — величины, измеренные в лазерных экспериментах (взяты из работы [46] и ссылок в ней). Крестики — расчётные значения параметра при пороговых дозах лазерного повреждения [46,47]

На основании этих сравнений в работе делается вывод о существовании, в дополнение к основанному на рассеянии электронов на атомах мишени, механизма быстрой трансформации неравновесной потенциальной энергии мишени, формируемой экстремальным электронным возбуждением, в кинетическую энергию (нагрев) атомов на временах порядка времени остывания электронной подсистемы (100 фс) [39,45].

Этот механизм обосновывается зависимостью межатомного потенциала от состояния электронной подсистемы мишени. Мгновенное по отношению к динамическим временам атомного ансамбля экстремальное возбуждение электронной подсистемы резко изменяет потенциальную поверхность атомов в конденсированной среде. Мгновенно изменяющиеся силы, ускоряют атомы, стремящиеся найти новые положения равновесия, что приводит к увеличению их кинетической энергии («нетермическому адиабатическому нагреву») [45].

Совпадающие с экспериментальными, значения параметра скорости передачи энергии от электронной в ионную подсистему, полученные в расчётах с использованием метода сильной связи, подтвердили реализацию этого механизма в окрестности траекторий БТИ [45] (см. Рисунок 7).

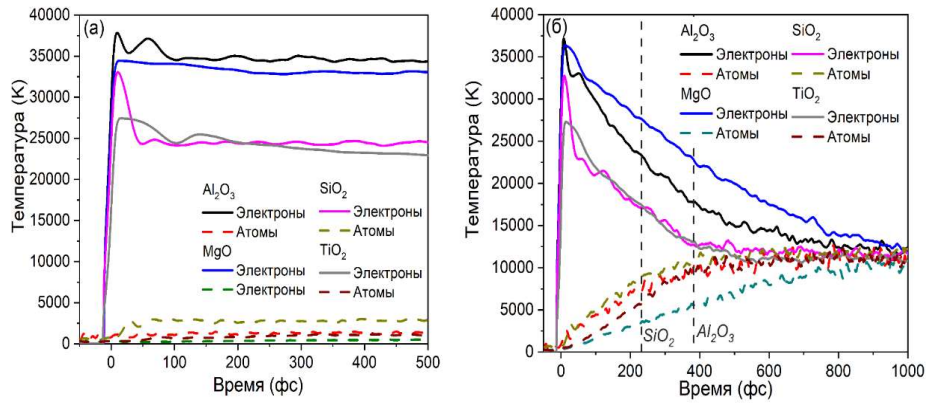


Рисунок 7 - Изменения электронной и атомной температур после мгновенного выделения энергии в 4 эВ/ат в электронные системы Al₂O₃, MgO, SiO₂, и TiO₂ [45]. Моделирование проводилось: (а) в адиабатическом приближении с учётом изменения межатомного потенциала и без учёта электрон-атомного рассеяния; (б) с учётом рассеяния. Пунктирные вертикальные линии указывают характерные времена нагрева ионной подсистемы, необходимые для объяснения экспериментальных данных для треков БТИ.

Более подробное *ab-initio* моделирование показало возможность схлопывания запрещённой зоны диэлектриков в результате нетермического процесса на временах сравнимых со временем остывания электронной подсистемы в треке БТИ (~100 фс) [45,48,49]. Рисунок 8 показывает, что в окиси алюминия этот эффект возникает при превышении высаженной в электронную подсистему пороговой дозы в ~3,25 эВ/ат.

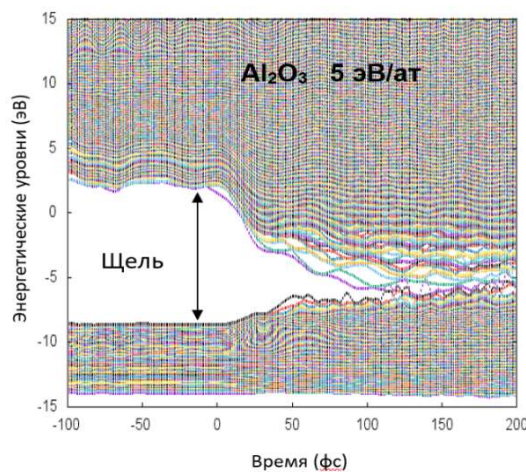


Рисунок 8 - Схлопывание запрещённой зоны Al₂O₃ при выделении в его электронную подсистему энергии 5 эВ/ат [45].

Это позволило обосновать сопутствующую адиабатическому изменению атомного потенциала передачу энергии от электронной подсистемы, как передачу потенциальной энергии возникших валентных дырок (электрон-дырочных пар), с учётом их пространственного распределения, в атомную подсистему материала на временах остывания электронного возбуждения в треке БТИ, т.е. на временах окончания МК расчёта.

Суммарная энергия, переданная в ионную подсистему в результате рассеяния электронов на атомах и в результате изменения межатомного потенциала, формирует начальное распределение плотности избыточной энергии атомного ансамбля, обеспечивающее возникновение наблюдаемых структурных изменений в треках БТИ в диэлектриках.

На рисунке Рисунок 9а представлено радиальное распределение энергии решётки в треках ионов Bi 700 МэВ и Xe 167 МэВ в Al_2O_3 , формируемое к моменту времени 100 фс в результате передачи энергии от электронной подсистемы по каналу рассеяния и нетермическому каналу. Видно, что вклад рассеяния электронов и дырок наиболее заметен в самом центре трека ($<3\text{Å}$). При увеличении расстояния от траектории иона начинает доминировать вклад релаксации потенциальной энергии, связанный с нетепловым ускорением атомов за счёт схлопывания запрещённой зоны.

Рисунок 9б [39] указывает на то, что передача энергии атомам решётки за счёт рассеяния электронов и дырок происходит начиная с 10 фс. Разница между полным нагревом атомов в результате рассеяния и их нагревом исключительно разлетающимися электронами демонстрирует важность упругого рассеяния валентных дырок. К моменту $\sim 100\text{-}200$ фс ни у электронов, ни у дырок не остаётся значительной кинетической энергии, и вся избыточная энергия электронной подсистемы аккумулируется и локализуется, как потенциальная энергия электрон-дырочных пар (валентных дырок).

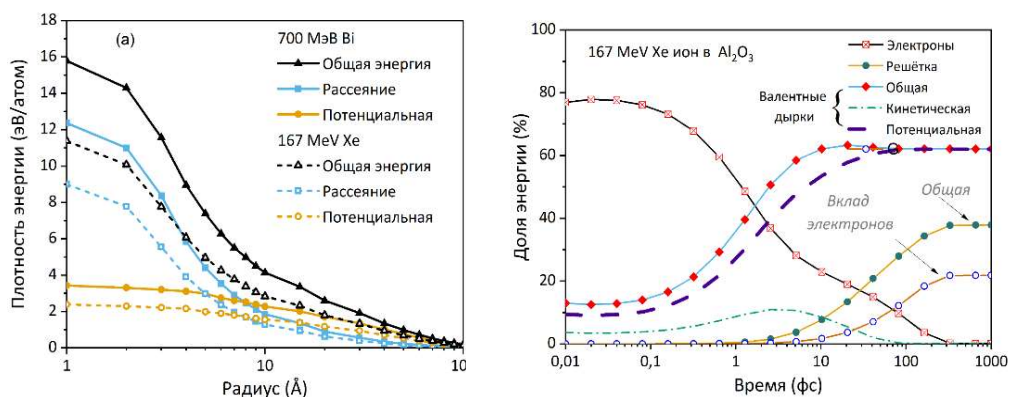


Рисунок 9 - (а) Радиальное распределение плотности энергии переданной в решётку при рассеянии электронов и дырок и конвертации энергии валентных

дырок после пролёта (100 фс) ионов Bi 700 МэВ и Xe 167 МэВ в Al₂O₃ [24]. (б)

Рассчитанные с помощью TREKIS [39] доли энергии, накопленной в каждой подсистеме Al₂O₃. Энергия, передаваемая атомам решётки только от электронов - пустые кружки, и от электронов и валентных дырок - полные кружки.

В четвёртой главе представлены результаты моделирования кинетики структурных изменений в треках БТИ в различных материалах и сравнение этих результатов с экспериментальными данными. Для этого в работе использовался открытый молекулярно-динамический (МД) код LAMMPS [50]. Применялись прошедшие многократную проверку на различных задачах межатомные потенциалы, которые предварительно верифицировались в тестовых расчётах. В зависимости от поставленной задачи использовались ансамбли постоянной температуры, объёма, давления или энергии.

В начале главы продемонстрированы примеры морфологии изолированного трека в диэлектрике. Рисунок 10 демонстрирует формирование в Al₂O₃ вдоль траектории налетающего иона 167 МэВ Хе - цилиндрической колонны диаметром ~ 1,8 нм, состоящей из прерывистой цепочки сильно повреждённых областей. Экспериментальные результаты, включая дифракционные данные, подтверждают подобную структуру трека с сильно искажённой дефектной решёткой, которая, всё же, не переходит в аморфное состояние. Фазовый анализ ПЭМ изображения и проведённые расчёты указывают на значительное понижение плотности материала (~7%) в центральной области диаметром ~ 1,8 нм. Вынос этого материала на периферию повреждённой области, сопровождаемый образованием ударных волн, приводит к образованию поджатой оболочки трека диаметром ~4 нм с повышенной атомной плотностью (~1%).

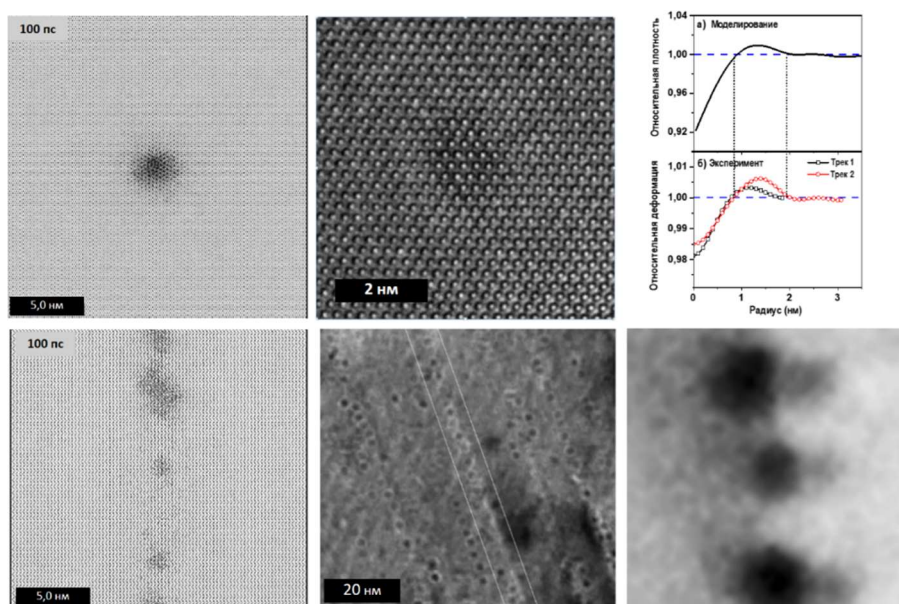


Рисунок 10 - Сравнение результатов моделирования пролёта иона Хе 167 МэВ в Al_2O_3 с ПЭМ изображением высокого разрешения [51] и [52]. Представлены проекции вдоль и поперёк траектории иона, рассчитанной радиальной зависимости плотности оксида алюминия через 100пс после пролёта частицы и полученного с помощью анализа ПЭМ распределения относительной деформации в этом треке [53]

Экспериментально и теоретически изучены отклики трёх диэлектриков MgO , Al_2O_3 and $\text{Y}_3\text{Al}_5\text{O}_{12}$ (YAG) на облучение ионами Хе с энергией 167 МэВ [54]. Моделирование показало очень схожие первичное возбуждение электронной и ионной подсистем и потери энергии налетающих ионов в этих материалах. Первичные повреждения материала были также схожи. Однако, релаксация возбуждённого состояния решётки проходила по-разному, что привело к совершенно различной структуре окончательно сформировавшихся треков. Рисунок 11 показывает, что треки не возникли в MgO . Прерывистая цепочка сильно повреждённых, но кристаллических областей (диаметром примерно 2 нм), появилась вдоль траекторий ионов в Al_2O_3 . Полностью аморфные треки возникли в YAG. Образование подобных трековых структур в Al_2O_3 и YAG были подтверждены данными ПЭМ высокого разрешения.

Эти результаты позволили выделить, наряду с процессами возбуждения материала, релаксацию структуры (рекристаллизацию) первично создаваемой неупорядоченной и неравновесной области в течение времени остывания горячих треков (~20-100пс), как одного их доминантных процессов, определяющих кинетику структурных изменений в рассмотренных оксидах при облучении пучками БТИ. Были проанализированы влияния на восстановление повреждений в треках величины вязкости в расплавленном состоянии, особенностей структуры решётки и разницы в кинетике металлических и кислородных подрешёток на поверхности кристаллизации в исследуемых материалах.

Важно, что, из-за рекристаллизации наблюдаемые в экспериментах структурные изменения могут не соответствовать начальному повреждению материала в треке. Это делает не обоснованным использование экспериментальных данных, фиксирующих структурные изменения в треках после их остывания, для реализации процедуры подгонки параметров моделей возбуждения материала в треке БТИ, например, параметров модели термической вспышки.

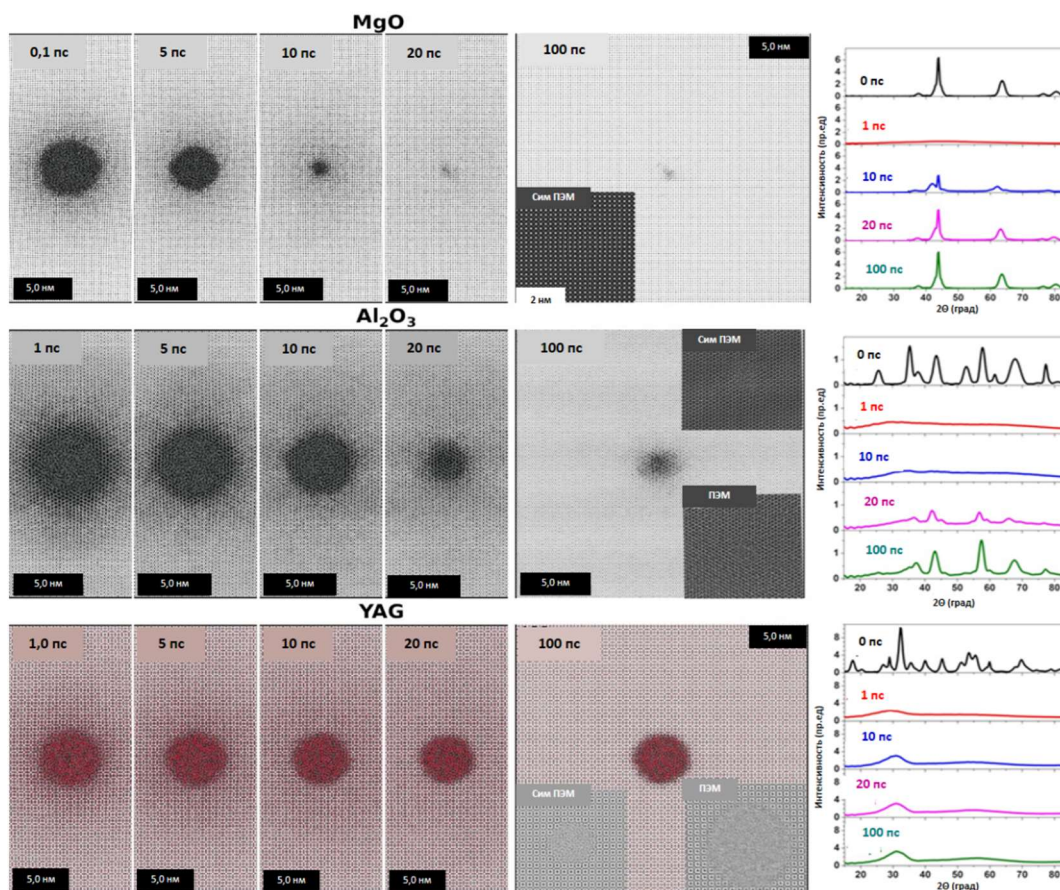


Рисунок 11 - Изображение ячеек моделирования в различные моменты времени после пролёта 167 МэВ Хе с ПЭМ и МД СимПЭМ вставками [54] и рассчитанными порошковыми рентгенограммами

На примере оливина-форстерита (Mg_2SiO_4) в главе проиллюстрирована возможность определения структурных изменений вдоль всей траектории налетающего иона (10-1000 мкм в зависимости от массы и энергии иона) (см. Рисунок 12). Модели, например, термической вспышки, основанные на подгоночной процедуре, принципиально не могут этого делать, т.к. используют пространственные параметры структурных изменений в фиксированном сечении траектории, например, радиус повреждённой области на фотографии электронного микроскопа.

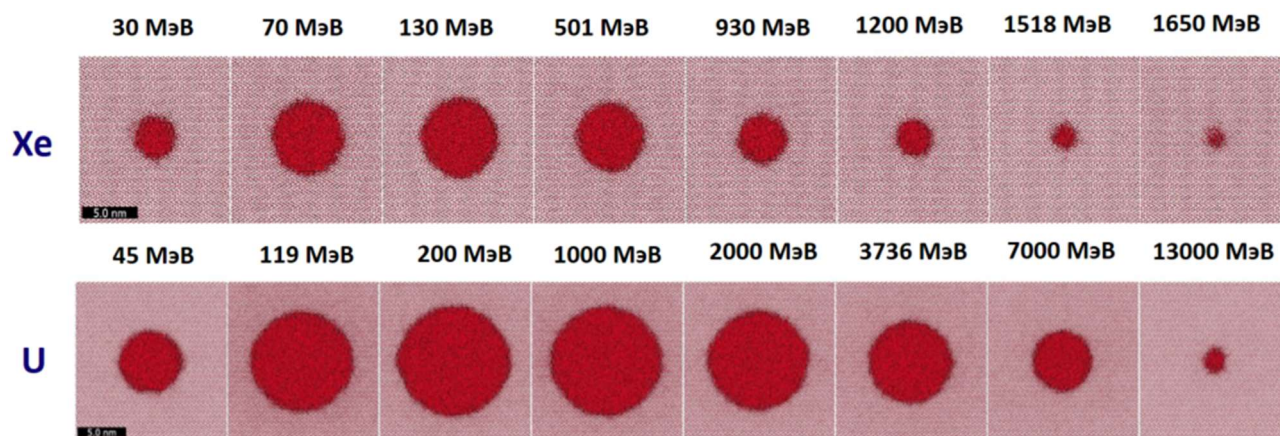


Рисунок 12 – Поперечные размеры структурно-изменённых треков в Mg_2SiO_4 в зависимости от энергии ионов Xe и U

Рисунок 13 [55] показывает, что положение области максимальных повреждений на траектории иона не совпадает с положением Брегговского пика электронных потерь энергии, что является проявлением эффекта скорости, как и различие в пороговых значениях высаживаемой энергии, стимулирующей начало структурных изменений в начале и в конце траектории: для высоких и низких энергий налетающего иона.

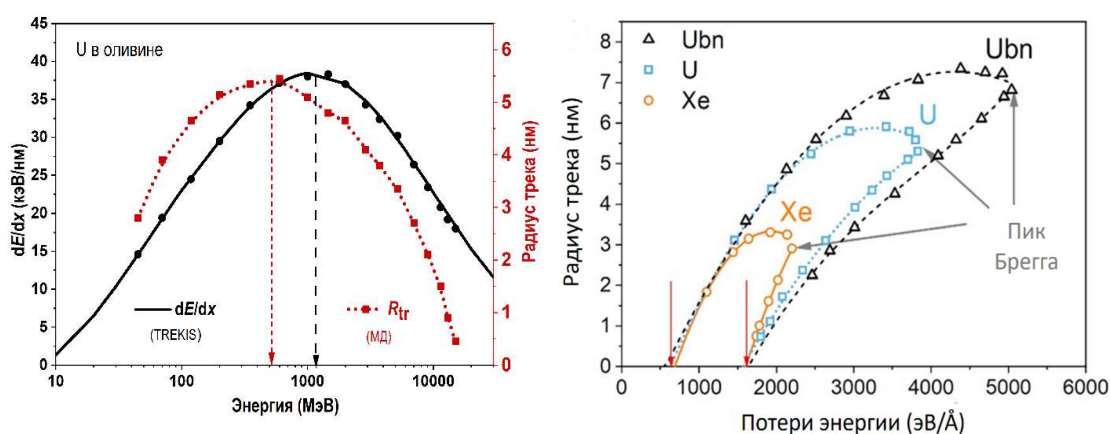


Рисунок 13 – (левая панель) Радиусы треков и электронные потери энергии иона U в форстерите в зависимости от энергии иона. Вертикальные стрелки указывают положение максимумов на соответствующих кривых. (правая панель)

Зависимость радиусов треков от электронных потерь энергии ионов Xe, U и гипотетического иона ${}_{120}^{304}U_{bn}$ (50-25000 MeV) в форстерите.

Количественный прогноз структурных изменений вдоль всей траектории налетающего БТИ, который позволяет сделать разработанная модель, открывает дополнительные возможности разработки методов объёмного наноструктурирования материалов.

При высоких дозах облучения, реализуемых, например, для осколков деления в компонентах ядерных реакторов и ядерного топлива ($\sim 10^{16}$ см⁻²), многократное перекрытие треков может непредсказуемо изменять кинетику накопления повреждений. В главе представлены результаты моделирования [56] эффекта согласованной релаксации повреждённой структуры близко расположенных треков и определена критическая избыточная энергия решётки ($\sim 0,4$ эВ/атом), обеспечивающая релаксацию перекрывающихся треков в оксиде алюминия. Рисунок 14 показывает, что трек одиночного иона Вi710 МэВ имеет диаметр $\sim 3,4$ нм, что хорошо согласуется с экспериментальным значением $\sim 3,5$ нм.

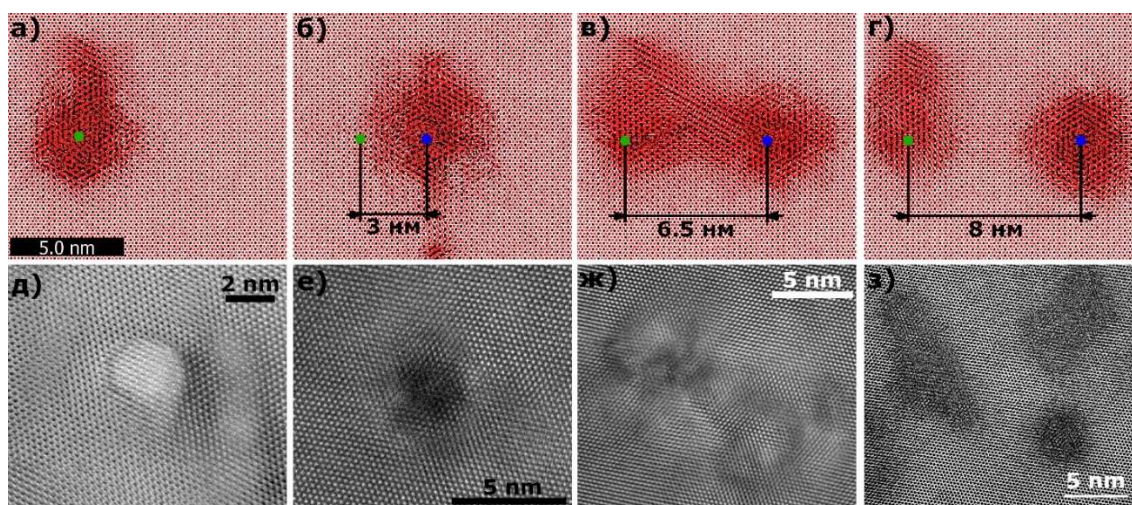


Рисунок 14 - Сравнение результатов моделирования (верхний ряд) эффекта релаксации близких треков ионов Вi с энергией 700 МэВ в Al₂O₃ и экспериментальных (нижний ряд) проявлений этого эффекта

Временно неупорядоченная горячая область, созданная вторым ионом, упавшим на малом расстоянии (~ 3 нм) от траектории первого трека, полностью перекрывает первый ранее существовавший трек. В этом случае существовавшая в первом треке дефектная структура практически полностью отжигается, и наблюдается только второй трек. Релаксация повреждений при взаимодействии близко расположенных треков объясняет эффект насыщения поверхностной плотности треков при дозах облучения превышающих величину 10^{12} см⁻².

Прохождение второго иона Вi на расстоянии ~ 6.5 нм приводит лишь к частичному отжигу трека предыдущего иона. Повреждение материала в пределах области первого трека менее выражено после прохождения второго иона, но все же присутствует. Кратковременно, на пикосекундной шкале времени, периферия горячего неупорядоченного трека перекрывается с замороженным повреждённым треком предыдущего иона. Существование предварительно повреждённого

материала (из первого трека) препятствует полной рекристаллизации периферии второго трека. Вместо этого во время затвердевания между двумя траекториями ионов образуется новая повреждённая область. Это приводит к накоплению структурных изменений в кристалле оксида алюминия, облучённом ионами Вi с энергией 700 МэВ, с увеличением флюенса.

Неупорядоченная область, образованная пролётом иона Вi на расстоянии 8 нм от траектории первого иона не перекрывается с ранее существовавшим треком, и на его рекристаллизацию практически не влияет наличие повреждения решётки, индуцированного первым ионом. Это приводит к образованию двух изолированных треков в ячейке моделирования и линейной зависимости объёма повреждений от флюенса.

В пятой главе представлены результаты применения разработанных методов для решения фундаментальных задач, связанных с экстремальным возбуждением электронной подсистемы конденсированных тел.

Структурные изменения и взаимодействие рождающихся электронов со средой приводят к химической активации материала вдоль трека БТИ. Этот эффект используется для травления треков. Задача травления треков актуальна, как для технологических приложений (полимерные тонкие фильтры, шаблоны для производства нанопроволок и нанотрубок), так и для разработки методик детектирования тяжёлых ядер. В частности, травление треков в метеоритном оливине ($(\text{Mg}_{0.88}\text{Fe}_{0.12})_2\text{SiO}_4$) даёт возможность исследовать спектр тяжёлых ядер в составе космических (галактических) лучей.

Для решения задачи дополнительной калибровки этих экспериментов была разработана модель жидкостного химического травления треков БТИ. Модель учитывает обе возможные моды травления: контролируруемую диффузией молекул травителя до фронта травления и контролируруемую реакцией этих молекул с материалом. Было рассмотрено два механизма активации оливина. Первый механизм связывался со структурными изменениями в треке. Нейтрализация металлических атомов распространяющимися электронами предполагалась основой второго механизма. Разработанная модель (МК TREKIS + МД) позволила учесть оба этих механизма и построить распределение активированного материала вдоль всей траектории тяжёлого иона. Модель жидкостного травления использует эти данные, как начальное условие. Модель была применена для описания химической активации и травления треков ионов золота с энергией 2 ГэВ в оливине. Рисунок 15 показывает, что расчётная скорость травления (38 мкм/час) оказалась в хорошем согласии с экспериментальными значениями (24 мкм/час), что

позволило провести взаимную калибровку модели и экспериментальной методики [57].

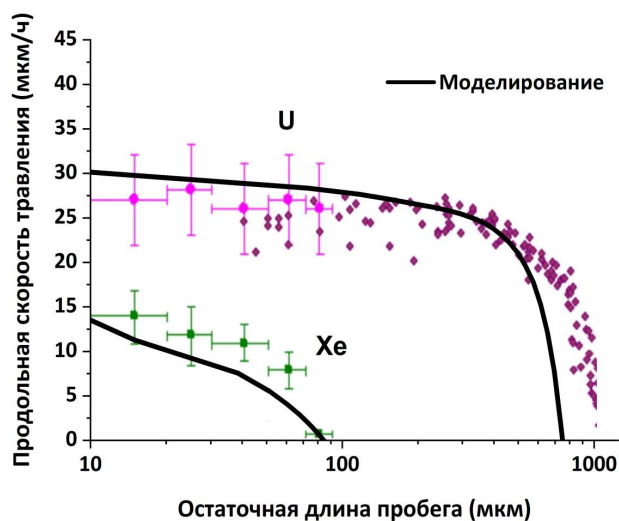


Рисунок 15 - Продольная скорость травления, как функция остаточной длины пробега ионов 1.7 ГэВ Хе и 16 ГэВ U в $(\text{Mg}_{0.11}\text{Fe}_{0.89})_2\text{SiO}_4$. Сплошные линии представляют результаты моделирования. Экспериментальные данные взяты из работы [58]. Порог регистрации размера травлёного сечения трека – 400нм.

В главе также представлены результаты работ по исследованию нетермических механизмов структурных изменений в диэлектриках, стимулированных резким изменением межатомного потенциала при мгновенном, с точки зрения атомной динамики, возникновении экстремального возбуждения электронной подсистемы материала.

С помощью *ab-initio* молекулярной динамики, использующей методы теории функционала плотности (ТФП-МД) (программа Quantum Espresso), показана не только возможность нетермического плавления окиси алюминия [59]. Обнаружено возникновение суперионного состояния в этом материале, характеризуемого плавлением (жидкостным поведением) только подрешётки кислорода [59]. Рисунок 16 показывает, что это состояние возникает при электронных температурах, превышающих пороговое значение в 2,75 эВ (доза 1.4 эВ/атом, 4.8% электронов в зоне проводимости), но меньших, пороговой электронной температуры для нетермического плавления Al_2O_3 (3,75 эВ, доза 3.5 эВ/атом, в зоне проводимости 8.8% электронов). Ранее, возникновение такого состояния наблюдалось для воды при давлениях, характерных для центра планет-гигантов.

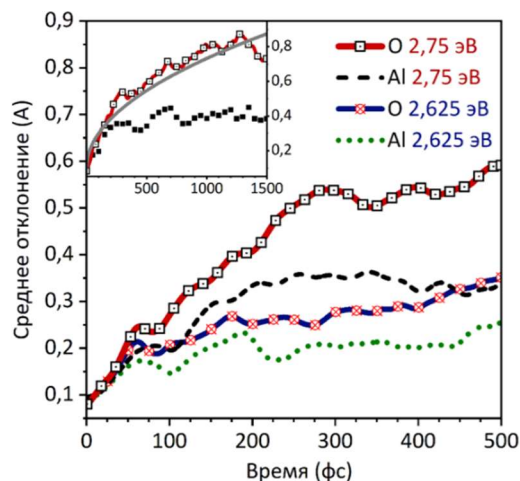
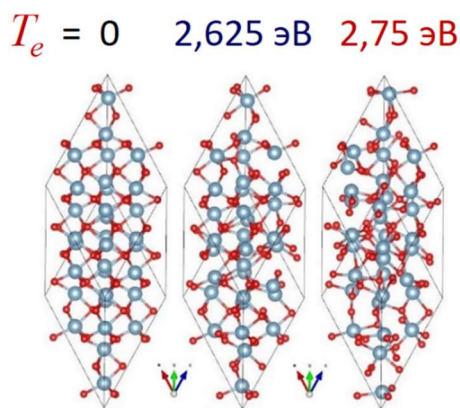


Рисунок 16 - Возникновение суперионного состояния в Al_2O_3 при электронных температурах $2,75 \text{ эВ} < T_e < 3,75 \text{ эВ}$, когда наблюдается жидкостное поведение подрешётки кислорода - зависимость от времени среднего отклонения атомов кислорода от положений равновесия подчиняется диффузионному закону $\sim t^{1/2}$

Показано, что охлаждение суперионного состояния, производимое при высоких давлениях, больших 400 ГПа стабилизирует структурные изменения: подрешётка кислорода остаётся в аморфном состоянии, тогда, как подрешётка алюминия сохраняет кристаллическую структуру.

Отметим, что время возникновения суперионного состояния превышает время остывания электронной подсистемы в треках БТИ в Al_2O_3 . Однако, это время меньше, чем время остывания пятна фемтосекундного рентгеновского лазера на свободных электронах, что делает интересным и обоснованным экспериментальный поиск суперионных состояний в диэлектриках с использованием этих лазеров.

Кроме того, Рисунок 17 показывает, что при электронных температурах больших 3,25 эВ (доза 2.3 эВ/атом, 6.8% электронов в зоне проводимости) даже небольшое нетермическое смещение атомов приводит к быстрому уменьшению и даже коллапсу запрещённой зоны оксида алюминия уже на временах меньших 100фс, сравнимых со временами остывания электронной подсистемы в треке БТИ. Как отмечалось, это приводит к возникновению дополнительного канала быстрого нагрева ионной подсистемы материала в результате выделения энергии, аккумулируемой в валентных дырках.

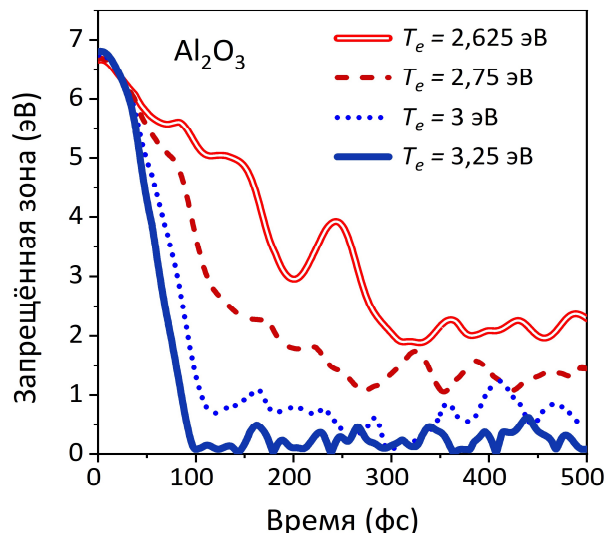


Рисунок 17 Коллапс запрещённой зоны оксида алюминия при повышенных электронных температурах.

Поскольку характерные электронные температуры, стимулирующие резкое уменьшение запрещённой зоны, выше чем температуры возникновения суперионного состояния в Al₂O₃, это может вызывать появление суперионных состояний с разной степенью электронной проводимости: диэлектрической, полупроводниковой, металлической.

В заключении приведены основные результаты диссертационной работы.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В результате выполнения диссертационной работы:

1. Построена гибридная мультимасштабная модель, описывающая образование структурно изменённых треков быстрых тяжёлых ионов (БТИ), тормозящихся в диэлектриках в режиме электронных потерь энергии объединяющая:

(а) разработанную Монте-Карло модель TREKIS, описывающую возникновение и распространение электронного возбуждения и обмен энергией с ионной подсистемой мишени в нанометрической окрестности траекторий БТИ,

(б) молекулярно-динамическую модель на основе открытого кода LAMMPS, описывающую, после остывания электронной подсистемы, пространственное распространение возбуждения в ионной подсистеме и структурно-фазовые изменения, в течение релаксации этого возбуждения.

Модель позволяет описывать все стадии кинетики трека без использования подгоночных параметров. Она впервые дала возможность не только для количественного описания экспериментальных результатов без использования

подгоночных параметров, но и для адекватного прогнозирования результатов планируемых экспериментов. Предсказательный характер модели, позволил многократно протестировать её в различных экспериментах.

2. Показано, что построенные сечения взаимодействия заряженных частиц с мишенью, основанные на процедуре восстановления функции потерь материала из оптических данных и учитывающие коллективную реакцию атомной и электронной подсистем мишени на вносимое возбуждение, количественно и в согласии с экспериментом описывают возбуждение электронной подсистемы, её пространственно-временную эволюцию и обмен энергией с ионным ансамблем мишени.

3. Построен учитывающий коллективный отклик мишени на возбуждение аналитический вид сечений рассеяния релятивистских заряженных частиц во всём относящимся к проблеме БТИ диапазоне передаваемых энергий. Этот результат позволяет на два порядка сократить время МК моделирования (TREKIS) возбуждения электронной подсистемы мишени в треках тяжёлых релятивистских ионов.

4. Показано, что из-за субпикосекундной пространственной диссипации электронного возбуждения рассеяние электронов и дырок не может обеспечить передачу атомной решётке энергии, необходимой для инициирования наблюдаемых в эксперименте структурных изменений в окрестности траектории БТИ. Сделан вывод, что рассеяние электронов и дырок не является единственным механизмом нагрева решётки в треке БТИ. Обоснован и выделен нетермический механизм передачи энергии от возбуждённой электронной к ионной подсистеме мишени, связанный с резким изменением межатомного потенциала в результате мгновенного экстремального возбуждения электронной подсистемы: конвертация неравновесной потенциальной энергии мишени в кинетическую энергию атомов. Установлена определяющая роль этого механизма в нагреве атомной подсистемы в треке БТИ в различных материалах. Принимая во внимание эффект схлопывания запрещённой зоны при сильном возбуждении электронной подсистемы, предложена простая модель учёта этого механизма, основанного на передаче потенциальной энергии валентных дырок (электрон-дырочных пар) в ионную подсистему после остывания электронной подсистемы.

5. Определены параметры пространственно-временных распределений основных величин, характеризующих состояния возбуждённых электронной и ионной подсистем в треках БТИ в исследуемых материалах: плотности генерируемых электронов и дырок и плотности их энергии, плотность энергии в ионной подсистеме.

6. Продемонстрирована принципиальная важность релаксации (рекристаллизации) первичного повреждения трековой области в течение остывания трека на формирование наблюдаемых структурных изменений в окрестности траекторий БТИ. Исследована кинетика этой релаксации в различных материалах. Отмечено, что возможность значительной релаксации (рекристаллизации) первично повреждённой области делает необоснованным применение наблюдаемого в эксперименте размера трека в качестве подгоночного параметра моделей формирования структурно-изменённых треков БТИ, в частности, в модели термической вспышки.

7. На основании представленной модели разработана методика, впервые позволяющая производить расчёт параметров возбуждения и возникающих повреждений вдоль всей траектории налетающего БТИ. Применение этой методики на примере оливина показано, что положение максимума повреждений на траектории иона не совпадает с положением Брегговского пика электронных потерь энергии налетающего иона. Реализуясь при меньших энергиях иона, максимальные повреждения возникают ближе к точке остановки иона. Показано, что причиной этого является влияние скорости налетающего иона на спектр генерируемых первичных электронов. Продемонстрировано фундаментальное различие в необходимых для формирования структурно изменённых треков пороговых значениях электронных потерь энергии ионов, имеющих энергии меньше и больше той, при которой реализуется брегговский максимум электронных потерь.

8. Впервые для типичных экспериментальных плотностей потоков ионов количественно описаны эффекты взаимодействия и рекомбинации накапливаемых повреждений при перекрытии треков БТИ при высоких флюенсах облучения.

9. В диссертации продемонстрирована возможность добавления в разработанную мультимасштабную модель новых модулей, описывающих проявления облучения БТИ на больших временных масштабах, а также использование полученных наработок в других направлениях исследований. В частности,

А) На примере оливина построена оригинальная количественная модель, позволяющая на основе полученных в результате моделирования данных о параметрах возбуждения и структурных изменениях определить степень химической активации материала в окрестности траектории БТИ. Показано, что электронное возбуждение играет существенную роль в химической активации материалов, вплоть до микронных расстояний от траектории БТИ.

Используя эти результаты, построена модель жидкостного травления треков БТИ в оливине. В модели применяется закон действующих масс и теория активированного комплекса, а также учитывается механизм подвода/отвода молекул травителя/продуктов травления на/от травящуюся поверхность. В модели не применяются подгоночные параметры. Достоверность предсказаний модели о скорости травления и размерах травимых треков подтверждена её экспериментальным тестированием. Применение модели позволило откалибровать экспериментальную методику регистрации тяжёлой компоненты галактических космических лучей в метеоритном оливине.

Б) Полученное в результате выполнения диссертации знание по нетермическому изменению структур электронной и ионной подсистем диэлектриков под воздействием экстремального электронного возбуждения было использовано при описании эффектов облучения материалов рентгеновскими фемтосекундными лазерами на свободных электронах.

В частности, впервые продемонстрирована возможность возникновения суперионного состояния окиси алюминия: жидкостное поведение кислородной компоненты при сохранении упорядоченной структуры алюминиевой подрешётки. Показано, что суперионное состояние возникает в результате резкого изменения межатомных потенциалов после мгновенного экстремального превышения электронной температуры порогового значения ($T_e > 2,75$ эВ). Указано, что этот эффект может проявляться в пятнах импульсов фемтосекундных рентгеновских лазеров.

Указано на возможность стабилизации давлением (больше 400 Гпа) атомной структуры суперионного состояния после остывания трека.

Показано, что из-за возникающего коллапса запрещённой зоны, в зависимости от достигнутого уровня электронного возбуждения суперионное состояние в оксидах может быть диэлектрическим, полупроводниковым или проводящим.

ОСНОВНЫЕ ПУБЛИКАЦИИ АВТОРА ПО ТЕМАТИКЕ ДИССЕРТАЦИИ

1. Ryazanov A.I., Volkov A.E., Klaumünzer S. Model of track formation // *Physical Review B*. 1995. v. 51. n. 18. P. 12507
2. Volkov A.E., Borodin V.A. The rate of the electron-ion heat transfer in swift heavy particle track in metals // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B*. 1996. v. 107. n. 1-4. P.172

3. Volkov A.E., Borodin V.A. Heating of metals in swift heavy ion tracks by electron-ion energy exchange // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B. 1998. v. 146. n. 1-4. P.137
4. Ryazanov A.I., Trinakus H., Volkov A.E. Incubation dose for ion beam induced anisotropic growth of amorphous alloys: Insight into amorphous state modification // Physical Review Letters. 2000, v.84. n. 5. P. 919
5. Voskoboinikov R.E., Volkov A.E., Borodin V.A. Application of nanosize precipitates for estimation of temperature increase in thermal spikes // Radiation Effects and Defects in Solids. 2000. v. 152. n. 3. P. 181
6. Volkov A.E. Nucleation of nanoclusters in thermal spikes in solids irradiated with swift heavy ions // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B. 2002. v. 193. n. 1-4. P. 376
7. Volkov A.E., Borodin V.A. Effects of relaxation of electronic excitations from swift heavy ions in amorphous targets // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B. 2002. v. 193. n. 1-4. P. 381
8. Sorokin M.V., Volkov A.E. Model of nanoisland nucleation in surface thermal spikes caused by energetic electronic excitations // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B. 2003. v. 205. P. 746
9. Volkov A.E., Korolev D.N. Nanoprecipitate nucleation caused by swift heavy ions in supersaturated solid solutions // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B. 2003. v. 209. P. 98
10. Borodin V.A., Volkov A.E., Korolev D.N. Viscous flow of amorphous metals in swift heavy ion tracks // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B. 2003. v. 209. P. 122
11. Volkov A.E., Sorokin V.A. Nucleation of 2D nanoislands in surface thermal spikes from swift heavy ions // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B. 2003. v. 209. P. 184
12. Королев Д.Н., Волков А.Е. Образование нановыделений при распаде пересыщенных твёрдых растворов в треках быстрых тяжёлых ионов // Журнал Технической Физики. 2004. т.74. № 10. С. 64
13. Сорокин М.В., Волков А.Е. Условия образования nanoостровков в поверхностных термических вспышках при облучении материалов быстрыми тяжёлыми ионами // Журнал Технической Физики. 2004. т.74. № 10. С. 117
14. Baranov I., Kirillov S., Novikov A., Obnorskii V., Toulemonde M., Wienc K., Yarmiychuk S., Borodin V.A., Volkov A.E. Desorption of gold nanoclusters (2-150 nm) by 1GeV Pb ions // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B. 2005. v. 230. P. 495

15. Schwartz K., Volkov A.E., Voss K.-O., Sorokin M.V., Trautmann C., Neumann R. Thermal spike effect on defect evolution in NaCl irradiated with light and heavy ions at 8 and 300 K // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B. 2006. v. 245. P. 204
16. Schwartz K., Lang M., Neumann R., Sorokin M.V., Trautmann C., Volkov A.E., Voss K.-O. Damage creation in LiF and NaCl crystals irradiated with swift heavy ions at 8 and 300 K // Physica status solidi (c). 2007. V. 4, n. 3 P.1105
17. Rzadkiewicz J., Rosmej O., Blazevic A., Efremov V.P., Gójska A., Hoffmann D.H.H., Korostiy S., Polasik M., Słabkowska K., Volkov A.E. Studies of the $K\alpha$ X-ray spectra of low-density SiO₂ aerogel induced by Ca projectiles for different penetration depths // High Energy Density Physics. 2007. V. 3. n.1-2. P.233
18. Lushchik A., Lushchik Ch., Schwartz K., Vasil'chenko E., Papaleo R., Sorokin M., Volkov A. E., Neumann R., Trautmann C. Creation of nanosize defects in LiF crystals under 5- and 10- MeV Au ion irradiation at room temperature // Physical Review B. 2007. V. 76. P. 054114
19. Комаров Ф.Ф., Власукова Л.А., Ювченко В.Н., Волков А.Е., Бородин В.А. Образование треков в аморфном SiO₂ при облучении ионами высоких энергий: расчёт на базе модели термического пика // Доклады национальной академии наук Беларуси. 2007. т.51. № 7. С. 65
20. Schwartz K., Sorokin M.V., Lushchik A., Lushchik Ch., Vasil'chenko E., Papaleo R.M., de Souza D., Volkov A.E., Voss K.-O., Neumann R., Trautmann C. Color center creation in LiF crystals irradiated with 5-and 10-MeV Au ions // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B. 2008. v. 266. P. 2736
21. Medvedev N.A., Volkov A.E. Monte-Carlo Simulations of Electronic Excitations in Swift Heavy Ion // AIP Conference Proceedings Electron Microscopy And Multiscale Modeling. 2008. V.999., P. 238
22. Schwartz K., Volkov A.E., Sorokin M.V., Trautmann C., Voss K.-O., Neumann R., Lang M. Effect of electronic energy loss and irradiation temperature on color-center creation in LiF and NaCl crystals irradiated with swift heavy ions // Physical Review B. 2008. V. 78. P. 024120
23. Medvedev N.A., Volkov A.E., Rethfeld B., Shcheblanov N.S. Effect of inter-atomic Auger processes on relaxation of electronic vacancies at deep levels of highly ionized atoms in swift heavy ion tracks // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B. 2010. v. 268. n. 19. P. 2870
24. Medvedev N.A., Volkov A.E., Shcheblanov N.S., Rethfeld B. Early stage of the electron kinetics in swift heavy ion tracks in dielectrics // Physical Review B. 2010. V. 82. P. 125425

25. Schwartz K., Volkov A.E., Sorokin M.V., Neumann R., Trautmann C. Effect of irradiation parameters on defect aggregation during thermal annealing of LiF irradiated with swift ions and electrons // *Physical Review B*. 2010. V. 82. P. 144116
26. Lipp V.P., Volkov A.E., Sorokin M.V., Rethfeld B. Kinetics of propagation of the lattice excitation in a swift heavy ion track // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B*. 2011. v. 269. n. 9. P. 865
27. Baranov A.A., Medvedev N.A., Volkov A.E., Shcheblanov N.S. Effect of interaction of atomic electrons on ionization of an insulator in swift heavy ion tracks // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B*. 2012. v. 286. n. 9. P. 51
28. Sorokin M.V., Schwartz K., Voss K.-O., Rosmej O., Volkov A.E., Neumann R. Color centers beyond the swift ion ranges in LiF crystals // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B*. 2012. v. 285. P. 24
29. Medvedev N.A., Volkov A.E., Schwartz K., Trautmann C. Effect of spatial redistribution of valence holes on the formation of a defect halo of swift heavy-ion tracks in LiF // *Physical Review B*. 2013. V. 87. P. 104103
30. Rymzhanov R.A., O'Connell J., Skuratov V.A., Sohatsky A.S., Neethling J.H., Volkov A. E., Havancsak K. Effect of swift heavy ion irradiation on transformations of oxide nanoclusters in ODS alloys // *Phys. Status Solidi C*. 2013. v.10. n.4. P.681
31. Gorbunov S.A., Medvedev N.A., Terekhin P.N., Volkov A.E. The microscopic model of material excitation in swift heavy ion tracks // *Phys. Status Solidi C*. 2013. v.10. n.4. P.697
32. Medvedev N.A., Schwartz K., Trautmann C., Volkov A.E. Formation of the defect halo of swift heavy ion tracks in LiF due to spatial redistribution of valence holes // *Phys. Status Solidi B*. 2013. v.250. n.4. P.850
33. Gorbunov S.A., Terekhin P.N., Medvedev N.A., Volkov A.E. Combined model of the material excitation and relaxation in swift heavy ion tracks // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B*. 2013. v. 315. P. 173
34. Medvedev N.A., Rymzhanov R.A., Volkov A.E. Complex dielectric function formalism for description of the electron kinetics in swift heavy ion tracks in LiF and Y_2O_3 // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B*. 2013. v. 315. P. 85
35. Gorbunov S.A., Medvedev N.A., Rymzhanov R.A., Terekhin P.N., Volkov A.E. Excitation and relaxation of olivine after swift heavy ion impact // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B*. 2014. v. 326. P. 163
36. Rymzhanov R.A., Medvedev N.A., Volkov A.E. Monte-Carlo modeling of excitation of the electron subsystem of Al_2O_3 and polyethylene after swift heavy ion impact // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B*. 2014. v. 326. P. 238

37. Rymzhanov R.A., Medvedev N.A., Volkov A.E. Electron emission from silicon and germanium after swift heavy ion impact // *Phys. Status Solidi B*. 2011. v.252. n.1. P.159
38. Rymzhanov R.A., Medvedev N.A., Volkov A.E. Effect of atomic structure on excitation of the electronic subsystem of a solid by a swift heavy ion // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B*. 2015. v. 354. P. 292
39. Gorbunov S.A., Terekhin P.N., Medvedev N.A., Volkov A.E. Electron-lattice coupling after high-energy deposition in aluminum // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B*. 2015. v. 354. P. 220
40. Terekhin P.N., Rymzhanov R.A., Gorbunov S.A., Medvedev N.A., Volkov A.E. Effect of valence holes on swift heavy ion track formation in Al_2O_3 // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B*. 2015. v. 354. P. 200
41. Багуля А.В., Владимиров М.С., Волков А.Е., Гончарова Л.А., Горбунов С.А., Калинина Г.В., Коновалова Н.С., Окатьева Н.М., Павлова Т.А., Полухина Н.Г., Старков Н.И., Тан Найнг Со, Чернявский М.М., Щедрина Т.В. Зарядовый спектр сверхтяжёлых ядер галактических космических лучей по данным эксперимента Олимпия // *Краткие сообщения по физике Физического Института им. П.Н.Лебедева Российской Академии Наук*. 2015. т.42. вып. 5. С. 49
42. Medvedev N.A., Rymzhanov R.A., Volkov A.E. Time-resolved electron kinetics in swift heavy ion irradiated solids // *Journal of Physics D: Applied Physics*. 2015 v.48. 355303
43. Voronkov R.A., Rymzhanov R.A., Medvedev N.A., Volkov A.E. Monte-Carlo modeling of excitation of the electron subsystem of ZnO and MgO in tracks of swift heavy ions // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B*. 2015. v. 365. P. 468
44. Medvedev N.A., Volkov A.E., Ziaja B. Electronic and atomic kinetics in solids irradiated with free-electron lasers or swift-heavy ions // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B*. 2015. v. 365. P. 437
45. Gorbunov S.A., Rymzhanov R.A., Starkov N.I., Volkov A.E., Malakhov A.I. A model of chemical etching of olivine in the vicinity of the trajectory of a swift heavy ion // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B*. 2015. v. 365. P. 656
46. Rymzhanov R.A., Medvedev N.A., Volkov A.E. Effect of valence holes kinetics on material excitation in tracks of swift heavy ions // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B*. 2015. v. 365. P. 462

47. O'Connell J.H., Rymzhanov R.A., Skuratov V.A., Volkov A.E., Kirilkin N.S. Latent tracks and associated strain in Al₂O₃ irradiated with swift heavy ions // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B. 2016. v. 374. P. 97
48. Medvedev N.A., Rymzhanov R.A., Volkov A.E. Corrigendum: Time-resolved electron kinetics in swift heavy ion irradiated solids (2015 J. Phys. D: Appl. Phys. 48 355303) // Journal of Physic D: Applied Physics. 2016 v.49. 369501
49. Alexeev V., Bagulya A., Chernyavsky M., Gippius A., Goncharova L., Gorbunov S., Gorshenkov M., Kalinina G., Konovalova N., Liu J., Zhai P., Okatyeva N., Pavlova T., Polukhina N., Starkov N., Naing Soe T., Trautmann C., Savchenko E., Shchedrina T., Vasiliev A., Volkov A. Charge spectrum of heavy and superheavy components of galactic cosmic rays: results of the OLIMPIYA experiment // The Astrophysical Journal. 2016. 829:120
50. Rymzhanov R.A., Medvedev N.A., Volkov A.E. Effects of model approximations for electron, hole, and photon transport in swift heavy ion tracks // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B. 2016. v. 388. P. 41
51. Volkov A.E., Schwartz K., Medvedev N.A., C. Trautmann Effect of ion velocity on creation of point defects halos of latent tracks in LiF // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B. 2017. v. 407. P. 80
52. Gorbunov S.A., Malakhov A.I., Rymzhanov R.A., Volkov A.E. Model of wet chemical etching of swift heavy ions tracks // Journal of Physic D: Applied Physics. 2017 v.50. 395306
53. Medvedev N., Volkov A.E. Femto-clock for the electron kinetics in swift heavy ion tracks // Journal of Physic D: Applied Physics. 2017 v.50. 4445302
54. Rymzhanov R.A., Medvedev N., Volkov A.E. Damage threshold and structure of swift heavy ion tracks in Al₂O₃ // Journal of Physic D: Applied Physics. 2017 v.50. 475301
55. Алексеев В.А., Багуля А.В., Волков А.Е., Гиппиус А.А., Гончарова Л.А., Горбунов С.А., Калинина Г.В., Коновалова Н.С., Окатьева Н.М., Павлова Т.А., Полукина Н.Г., Старков Н.И., Тан Найг Сое, Чернявский М.В., Щедрина Т.В. Поиск острова стабильности «свертяжёлых ядер» с помощью природных трековых детекторов // Краткие сообщения по физике ФИАН. 2017. №11. С. 41
56. Alekseev V.A., Alexandrov A.B., Bagulya A.V., Chernyavskiy M.M., Goncharova L.A., Gorbunov S.A., Kalinina G.V., Konovalova N.S., Okatyeva N.M., Pavlova T.A., Polukhina N.G., Shchedrina T.V., Starkov N.I., Tioukov V.E., Vladymirov S., Volkov A.E. Current status and prospects of nuclear physics research based on tracking techniques // Journal of Physics Conference Series. 2017. V.798. UNSP 012207

57. Rymzhanov R.A., Medvedev N., Volkov A.E., O'Connell J.H., Skuratov V.A. Overlap of swift heavy ion tracks in Al_2O_3 // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B. 2018. v. 435. P. 121
58. Dependence of the kinetics of Al_2O_3 excitation in tracks of swift heavy ions on lattice temperature // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B. 2018. v. 435. P. 83
59. Voronkov R.A., Medvedev N., Rymzhanov R.A., Volkov A.E. Ab-initio modeling of Al_2O_3 lattice instability under extreme excitation of the electronic system // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B. 2018. v. 435. P. 87
60. Dauletbekova A., Skuratov V., Kirilkin N., Manika I., Maniks J., Zabels R., Akilbekov A., Volkov A., Baizhumanov M., Zdorovets M., Seitbayev A. Depth profiles of aggregate centers and nanodefects in LiF crystals irradiated with 34 MeV ^{84}Kr , 56 MeV ^{40}Ar and 12 MeV ^{12}C ions // Surface & Coating Technology. 2018. V.365. C. 16
61. Rymzhanov R.A., Gorbunov S.A., Medvedev N., Volkov A.E. Damage along swift heavy ion trajectory // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B. 2019. v. 440. P. 25
62. Khmel'nitski R.A., Kononenko V.V., O'Connell J.H., Skuratov V.A., Strykh G.F., Gippius A.A., Gorbunov S.A., Volkov A.E. Effect of the electronic kinetics on graphitization of diamond irradiated with swift heavy ions and fs-laser pulses // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B. 2019. v. 460. P. 47
63. Rymzhanov R.A., Medvedev N., O'Connell J.H., Janse van Vuuren A., Skuratov V.A., Volkov A.E. Recrystallization as the governing mechanism of ion track formation // Scientific Reports. 2019. V.9. P.3837
64. Karganov M.Yu., Alchinova I.B., Polyakova M.V., Feldman V.I., Gorbunov S.A., Ivanov O.M., Rymzhanov R.A., Skuratov V.A., Volkov A.E. Stability of dry phage lambda DNA irradiated with swift heavy ions // Radiation Physics and Chemistry. 2019. V.162. P.194
65. Алексеев В.А., Багуля А.В., Волков А.Е., Гиппиус А.А., Гончарова Л.А., Горбунов С.А., Калинина Г.В., Коновалова Н.С., Окатьева Н.М., Павлова Т.А., Полухина Н.Г., Старков Н.И., Тан Найг Сое, Чернявский М.В., Щедрина Т.В. Изучение радиационной истории палласитов методом трекового анализа // Краткие сообщения по физике ФИАН. 2019. №8. С. 15
66. Gorbunov S.A., Rymzhanov R.A., Volkov A.E. Dependence of track etching kinetics on chemical reactivity around the ion path // Scientific Reports. 2019. V. 9 P. 15325
67. Алексеев В.А., Багуля А.В., Волков А.Е., Гиппиус А.А., Гончарова Л.А., Горбунов С.А., Калинина Г.В., Коновалова Н.С., Окатьева Н.М., Павлова

Т.А., Полухина Н.Г., Старков Н.И., Тан Найг Сое, Чернявский М.В., Щедрина Т.В. Определение зарядов сверхтяжёлых ядер при поиске их в природе // Краткие сообщения по физике ФИАН. 2019. №12. С. 23

68. Rymzhanov R.A., O'Connell J.H., Janse van Vuuren A., Skuratov V.A., Medvedev N., Volkov A.E. Insight into picosecond kinetics of insulator surface under ionizing radiation // Journal of Applied Physics. 2020. V.127. P. 015901

69. Voronkov R.A., Medvedev N., Volkov A.E. Superionic state in alumina produced by nonthermal melting // physica status solidi - Rapid Research Letters. 2020. P.1900641

70. Janse van Vuuren A., Ibrayeva A., Rymzhanov R.A., Zhalmagambetova A., O'Connell J.H., Skuratov V.A., Uglov V.V., Zlotski S.V., Volkov A.E., Zdorovets M. Latent tracks of swift Bi ions in Si₃N₄ // Materials Research Express. 2020. V. 7. n. 2. P. 025512

71. Medvedev N., Volkov A.E. Analytically solvable model of scattering of relativistic charged particles in solids // Journal of Physics D: Applied Physics. 2020. V. 53. P. 235302

72. Medvedev N., Volkov A.E. Corrigendum: Analytically solvable model of scattering of relativistic charged particles in solids (2020 J. Phys. D: Appl. Phys. 53 235302) // Journal of Physics D: Applied Physics. 2022. V. 55. P. 015302

73. Rymzhanov R.A., Medvedev N., O'Connell J.H., Skuratov V.A., Janse van Vuuren A., Gorbunov S.A., Volkov A.E. Insights into different stages of formation of swift heavy ion tracks // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B. 2020. v. 473. P. 27

74. Gorbunov S.A., Ivliev S.V., Volkov A.E. Dependence of electron-lattice scattering cross sections on crystallographic orientations in Al₂O₃ and Mg₂SiO₄ // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B. 2020. v. 474. P. 41

75. Voronkov R.A., Medvedev N., Volkov A.E. Dependence of nonthermal metallization kinetics on bond ionicity of compounds // Scientific Reports. 2020. V. 10 P. 1307

76. Александров А.Б., Алексеев В.А., Багуля А.В., Волков А.Е., Гиппиус А.А., Гончарова Л.А., Горбунов С.А., Грачёв В.М., Дашкина А.Б., Калинина Г.В., Коновалова Н.С., Окатьева Н.М., Павлова Т.А., Полухина Н.Г., Старков Н.И., Тан Найнг Со, Чернавский М.М., Щедрина Т.В. Аномалия зарядового спектра ядер галактических космических лучей в оливинах как свидетельство радиационной истории метеоритов // Краткие сообщения по физике ФИАН. 2020. №47. С. 27

77. Rymzhanov R.A., Medvedev N., Volkov A.E. Damage kinetics induced by swift heavy ion impacts onto films of different thicknesses // *Applied Surface Science*. 2021. V. 566. P. 150640
78. Medvedev N., Babaev P., Chalupskyr J., Juha L., Volkov A.E. An interplay of various damage channels in polyethylene exposed to ultra-short XUV/X-ray pulses // *Physical Chemistry Chemical Physics*. 2021. V. 23. n.30. P. 16193
79. Karlušić M., Rymzhanov R.A., O'Connell J.H., Bröckers L., Tomić Luketić K., Siketić Z., Fazinić S., Dubček P., Jakšić M., Provatas G., Medvedev N., Volkov A.E., Schleberger M. Mechanisms of surface nanostructuring of Al₂O₃ and MgO by grazing incidence irradiation with swift heavy ions // *Surfaces and Interfaces*. 2021. V. 27. P. 101508
80. Voronkov R.A., Medvedev N., Volkov A.E. Superionic states formation in group III oxides irradiated with ultrafast lasers // *Scientific Reports*. 2022. V. 12 P. 5659
81. Medvedev N., Akhmetov F., Rymzhanov R.A., Voronkov R., Volkov A.E. Modeling Time-Resolved Kinetics in Solids Induced by Extreme Electronic Excitation // *Advanced Theory and Simulations*. 2022. P.2200091
82. Medvedev N., Volkov A.E. Nonthermal acceleration of atoms as a mechanism of fast lattice heating in ion tracks // *Journal of Applied Physics*. 2022. V.131. P. 225903
83. Medvedev N., Volkov A.E., Rymzhanov R., Akhmetov F., Gorbunov S., Voronkov R., Babaev P. Frontiers, challenges, and solutions in modeling of swift heavy ion effects in materials // *Journal of Applied Physics*. 2023. V.133. P. 100701

СПИСОК ЦИТИРОВАННОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

1. Ziegler J.F., Biersack J.P., Littmark U. The stopping and range of ions in solids. New York: Pergamon Press, 1985.
2. Lang M. et al. Fundamental Phenomena and Applications of Swift Heavy Ion Irradiations // *Comprehensive Nuclear Materials: Second Edition*. 2020.
3. Komarov F.F. Nano- and microstructuring of solids by swift heavy ions // *Physics-Uspekhi*. 2017. Vol. 60, № 05. P. 435–471.
4. Tracy C.L. et al. Redox response of actinide materials to highly ionizing radiation // *Nat. Commun*. 2015. Vol. 6.
5. Douki T. et al. Minor contribution of direct ionization to DNA base damage induced by heavy ions // *Int. J. Radiat. Biol*. 2006. Vol. 82, № 2.
6. Ferruz M.B. et al. New research in ionizing radiation and nanoparticles: The ARGENT project // *Nanoscale Insights into Ion-Beam Cancer Therapy*. 2016.
7. Cucinotta F.A., Durante M. Cancer risk from exposure to galactic cosmic

rays: implications for space exploration by human beings // *Lancet Oncology*. 2006. Vol. 7, № 5.

8. Cucinotta F.A., To K., Cacao E. Predictions of space radiation fatality risk for exploration missions // *Life Sci. Sp. Res.* 2017. Vol. 13.

9. Murat M., Akkerman A., Barak J. Electron and Ion Tracks in Silicon: Spatial and Temporal Evolution // *IEEE Trans. Nucl. Sci.* 2008. Vol. 55, № 6. P. 3046–3054.

10. Notthoff C. et al. Swift heavy ion irradiation of GaSb: From ion tracks to nanoporous networks // *Phys. Rev. Mater.* 2020. Vol. 4, № 4.

11. Yemini M. et al. The controlled fabrication of nanopores by focused electron-beam-induced etching // *Nanotechnology*. 2009. Vol. 20, № 24.

12. Choudhury N., Singh F., Sarma B.K. Effect of swift heavy ion irradiation on lead sulfide quantum dots embedded in polyvinyl alcohol // *Radiation Effects and Defects in Solids*. 2013. Vol. 168, № 7–8.

13. Gismatulin A. et al. Swift heavy ion stimulated formation of the Si quantum dots in Si/SiO₂ multilayer heterostructures. 2019.

14. Tepper J.E., Gunderson L.L. *Clinical Radiation Oncology* // *Clinical Radiation Oncology*. 2015.

15. Pompos A., Durante M., Choy H. Heavy ions in cancer therapy // *JAMA Oncology*. 2016. Vol. 2, № 12.

16. Medvedev N.A., Rymzhanov R.A., Volkov A.E. Time-resolved electron kinetics in swift heavy ion irradiated solids // *J. Phys. D. Appl. Phys.* 2015. Vol. 48, № 35. P. 355303.

17. Dufour C., Toulemonde M. Models for the Description of Track Formation // *Ion Beam Modification of Solids. Springer Series in Surface Sciences* / ed. Wesch W., Wendler E. Cham: Springer International Publishing, 2016. P. 63–104.

18. Klaumünzer S. Thermal-spike models for ion track physics: A critical examination // *Mat. Meddelelser*. 2006. Vol. 52. P. 293–328.

19. Daraszewicz S.L., Duffy D.M. Hybrid continuum–atomistic modelling of swift heavy ion radiation damage in germanium // *Nucl. Instruments Methods Phys. Res. Sect. B Beam Interact. with Mater. Atoms*. 2013. Vol. 303, № null. P. 112–115.

20. Caro A., Victoria M. Ion-electron interaction in molecular-dynamics cascades // *Phys. Rev. A*. 1989. Vol. 40, № 5. P. 2287–2291.

21. Ivanov D., Zhigilei L. Combined atomistic-continuum modeling of short-pulse laser melting and disintegration of metal films // *Phys. Rev. B. American Physical Society*, 2003. Vol. 68, № 6. P. 064114.

22. Toulemonde M. et al. Transient thermal processes in heavy ion irradiation

- of crystalline inorganic insulators // Nucl. Instruments Methods Phys. Res. Sect. B Beam Interact. with Mater. Atoms. North-Holland, 2000. Vol. 166–167. P. 903–912.
23. Medvedev N. et al. Modeling Time-Resolved Kinetics in Solids Induced by Extreme Electronic Excitation // Adv. Theory Simulations. John Wiley & Sons, Ltd, 2022. Vol. 5, № 8. P. 2200091.
24. Rymzhanov R., Medvedev N.A., Volkov A.E. Damage threshold and structure of swift heavy ion tracks in Al₂O₃ // J. Phys. D. Appl. Phys. IOP Publishing, 2017. Vol. 50. P. 475301.
25. Rymzhanov R.A., Medvedev N.A., Volkov A.E. Effects of model approximations for electron, hole, and photon transport in swift heavy ion tracks // Nucl. Instruments Methods Phys. Res. Sect. B Beam Interact. with Mater. Atoms. 2016. Vol. 388. P. 41–52.
26. Van Hove L. Correlations in Space and Time and Born Approximation Scattering in Systems of Interacting Particles // Phys. Rev. American Physical Society, 1954. Vol. 95, № 1. P. 249–262.
27. Kittel C. Quantum Theory of Solids, 2nd Revised Edition. John Wiley & Sons, Ltd, 1987. P. Chapt. 18.
28. Pines D., Nozières P. The theory of quantum liquids: normal fermi liquids // The Theory of Quantum Liquids Normal Fermi Liquids. Boca Raton: CRC Press, 1966. Vol. 1. 380 p.
29. Barkas W.H. Nuclear research emulsions. New York: Academic Press, 1963.
30. Ritchie R.H., Howie A. Electron excitation and the optical potential in electron microscopy // Philos. Mag. Taylor & Francis, 1977. Vol. 36, № 2. P. 463–481.
31. Medvedev N.A., Rymzhanov R.A., Volkov A.E. Time-resolved electron kinetics in swift heavy ion irradiated solids // J. Phys. D. Appl. Phys. 2015. Vol. 48, № 35. P. 355303.
32. Rymzhanov R.A., Medvedev N.A., Volkov A.E. Monte-Carlo modeling of excitation of the electron subsystem of Al₂O₃ and polyethylene after swift heavy ion impact // Nucl. Inst. Methods Phys. Res. B. Elsevier B.V., 2014. Vol. 326. P. 238–242.
33. Powell C.J., Jablonsky A. NIST Electron Inelastic-Mean-Free-Path Database: Version 1.2. Gaithersburg: National Institute of Standards and Technology, 2014. P. <http://www.nist.gov/srd/nist71.cfm>.
34. Powell C.J., Jablonski A. Evaluation of Calculated and Measured Electron Inelastic Mean Free Paths Near Solid Surfaces // J. Phys. Chem. Ref. Data. AIP Publishing, 1999. Vol. 28, № 1. P. 19.
35. Littmark J.F., Ziegler J.P., Biersack U. The Stopping and Range of Ions in

Solids. New York: Pergamon Press, 1985. 321 p.

36. Grande P.L., Schiwietz G. Convolution approximation for the energy loss, ionization probability and straggling of fast ions: 4 // Nucl. Instruments Methods Phys. Res. Sect. B Beam Interact. with Mater. Atoms. 2009. Vol. 267. P. 859–863.

37. Grande P.L., Schiwietz G. The unitary convolution approximation for heavy ions // Nucl. Instruments Methods Phys. Res. Sect. B Beam Interact. with Mater. Atoms. 2002. Vol. 195. P. 55–63.

38. Medvedev N. et al. Frontiers, challenges, and solutions in modeling of swift heavy ion effects in materials // J. Appl. Phys. AIP Publishing LLC AIP Publishing, 2023. Vol. 133, № 10. P. 100701.

39. Rymzhanov R.A., Medvedev N.A., Volkov A.E. Effect of valence holes kinetics on material excitation in tracks of swift heavy ions // Nucl. Instruments Methods Phys. Res. B. 2015. Vol. 365. P. 462–467.

40. Medvedev N., Volkov A.E. Analytically solvable model of scattering of relativistic charged particles in solids // J. Phys. D: Appl. Phys. IOP Publishing, 2020. Vol. 53, № 23. P. 235302.

41. Medvedev N., Volkov A.E. Corrigendum: Analytically solvable model of scattering of relativistic charged particles in solids (2020 J. Phys. D: Appl. Phys. 53 235302) // J. Phys. D: Appl. Phys. IOP Publishing, 2021. Vol. 55, № 1. P. 019501.

42. Gorbunov S.A. et al. The microscopic model of material excitation in swift heavy ion tracks // Phys. Status Solidi. 2013. Vol. 10, № 4. P. 697–700.

43. Gorbunov S.A. et al. Combined model of the material excitation and relaxation in swift heavy ion tracks // Nucl. Instruments Methods Phys. Res. Sect. B Beam Interact. with Mater. Atoms. 2013. Vol. 315. P. 173–178.

44. Gorbunov S.A. et al. Excitation and relaxation of olivine after swift heavy ion impact // Nucl. Instruments Methods Phys. Res. Sect. B Beam Interact. with Mater. Atoms. Elsevier B.V., 2014. Vol. 326. P. 163–168.

45. Medvedev N., Volkov A.E. Nonthermal acceleration of atoms as a mechanism of fast lattice heating in ion tracks // J. Appl. Phys. AIP Publishing LLC AIP Publishing, 2022. Vol. 131, № 22. P. 225903.

46. Medvedev N., Milov I. Electron-phonon coupling in metals at high electronic temperatures // Phys. Rev. B. American Physical Society, 2020. Vol. 102, № 6. P. 064302.

47. Medvedev N. Nonthermal phase transitions in irradiated oxides // J. Phys. Condens. Matter. 2020. Vol. 32, № 43. P. 435401.

48. Voronkov R.A. et al. Ab-initio modeling of Al₂O₃ lattice instability under extreme excitation of the electronic system // Nucl. Instruments Methods Phys. Res.

Sect. B Beam Interact. with Mater. Atoms. 2018. Vol. 435. P. 87–92.

49. Voronkov R.A., Medvedev N., Volkov A.E. Dependence of nonthermal metallization kinetics on bond ionicity of compounds // *Sci. Rep.* Nature Publishing Group, 2020. Vol. 10, № 1. P. 13070.

50. Thompson A.P. et al. LAMMPS - a flexible simulation tool for particle-based materials modeling at the atomic, meso, and continuum scales // *Comput. Phys. Commun.* North-Holland, 2022. Vol. 271. P. 108171.

51. Skuratov V.A. et al. On the threshold of damage formation in aluminum oxide via electronic excitations // *Nucl. Instruments Methods Phys. Res. Sect. B Beam Interact. with Mater. Atoms.* 2014. Vol. 326. P. 223–227.

52. O'Connell J.H., Rymzhanov R.A., Skuratov V.A. Track interference in swift heavy ion irradiated Al₂O₃ // *Сборник материалов конференции Взаимодействие излучений с твердым телом-2015.* Минск, Беларусь, 2015. P. <http://elib.bsu.by/handle/123456789/120015>.

53. O'Connell J.H. et al. Latent tracks and associated strain in Al₂O₃ irradiated with swift heavy ions // *Nucl. Instruments Methods Phys. Res. Sect. B Beam Interact. with Mater. Atoms.* 2016. Vol. 374. P. 97–101.

54. Rymzhanov R.A. et al. Recrystallization as the governing mechanism of ion track formation // *Sci. Rep.* 2019. Vol. 9, № 1. P. 3837.

55. Rymzhanov R.A. et al. Damage along swift heavy ion trajectory // *Nucl. Instruments Methods Phys. Res. Sect. B Beam Interact. with Mater. Atoms.* 2019. Vol. 440. P. 25–35.

56. Rymzhanov R.A. et al. Overlap of swift heavy ion tracks in Al₂O₃ // *Nucl. Instruments Methods Phys. Res. Sect. B Beam Interact. with Mater. Atoms.* 2018. Vol. 435. P. 121–125.

57. Gorbunov S.A., Rymzhanov R.A., Volkov A.E. Dependence of track etching kinetics on chemical reactivity around the ion path // *Sci. Rep.* 2019. Vol. 9, № 1. P. 15325.

58. Bagulya A. V. et al. Search for superheavy elements in galactic cosmic rays // *JETP Lett.* Springer US, 2013. Vol. 97, № 12. P. 708–719.

59. Voronkov R.A., Medvedev N., Volkov A.E. Superionic State in Alumina Produced by Nonthermal Melting // *Phys. Status Solidi - Rapid Res. Lett.* John Wiley & Sons, Ltd, 2020. Vol. 14, № 3. P. 1900641.

60. Medvedev N. et al. An interplay of various damage channels in polyethylene exposed to ultra-short XUV/X-ray pulses // *Phys. Chem. Chem. Phys.* The Royal Society of Chemistry, 2021. Vol. 23, № 30. P. 16193–16205.

