

УДК 538.911; 539.1.043; 548.4

РОЛЬ ДИНАМИЧЕСКОЙ ЭКРАНИРОВКИ В ПЕРЕДАЧЕ ЭНЕРГИИ АТОМАМ РЕШЁТКИ ПРИ ФОРМИРОВАНИИ ТРЕКОВ ИОНОВ, ТОРМОЗЯЩИХСЯ В GaN В РЕЖИМЕ ЭЛЕКТРОННЫХ ПОТЕРЬ ЭНЕРГИИ

С. В. Москалец¹, Р. А. Рымжанов^{2,3}, А. Е. Волков^{1,4}

Мультимасштабное моделирование показало, что формирование структурно изменённых треков быстрых тяжёлых ионов в GaN критически зависит от механизма динамического экранирования зарядов атомов мишени, влияющего на эффективность передачи энергии от возбуждённой электронной подсистемы в атомную решётку. На примере облучения ионами свинца продемонстрировано образование протяжённых треков с аморфным ядром, содержащим наноразмерные полости, заполненные азотом, что согласуется с результатами экспериментов. В окружающем ядро дефектном гало формируются устойчивые краевые дислокации, препятствующие рекристаллизации аморфной области при остывании трека.

Ключевые слова: GaN; быстрые тяжёлые ионы; электронные потери; трек; динамическое экранирование; аморфное ядро; азотные пузырьки; дислокации.

Введение. Радиационно стойкий широкозонный полупроводник нитрид галлия (GaN) рассматривается как перспективный материал космической электроники [1]. Это обуславливает необходимость детального исследования воздействия тяжёлой компоненты галактических космических лучей (ГКЛ) на его структуру и свойства. Эта компонента (частицы тяжелее гелия) составляет 1% всех ГКЛ и включает почти все элементы таблицы Менделеева. Из этого количества ядра с $Z \geq 26$ (преимущественно железо)

¹ ФИАН, 119991 Россия, Москва, Ленинский пр-т, 53; e-mail: s.moskalets@lebedev.ru.

² ОИЯИ, 141980 Россия, Дубна, ул. Жолио-Кюри, 6.

³ Институт ядерной физики, 050032 Казахстан, Алматы, ул. Ибрагимов, 1.

⁴ НИЦ “Курчатовский институт”, 123182 Россия, Москва, пл. Академика Курчатова, 1.

составляют всего 5%, а более тяжёлые частицы ($Z > 30$) менее 0.1%. Однако, такие ядра производят как экстремальное возбуждение электронной системы мишени, так и значительную структурную модификацию области трека. Попадание одного такого ядра в наноразмерные компоненты электроники может вызвать критический сбой или полный отказ оборудования [2].

Подобные ядра (быстрые тяжёлые ионы БТИ, массы $m > 10m_p$, m_p – масса протона, энергии $E > 1$ МэВ/нукл) тормозятся в материале в режиме электронных потерь [3] и процессы образования треков для них качественно схожи. Наиболее ярко эти механизмы проявляются при облучении самыми тяжёлыми ионами, что стимулирует активные ускорительные эксперименты именно с тяжёлыми ядрами. Моделирование эффектов такого облучения позволяет тестировать предлагаемые модели возбуждения и структурных изменений в треках БТИ.

Недавние эксперименты [4–6] показали, что БТИ-облучение GaN приводит к образованию цилиндрических треков ионов с наноразмерным аморфным ядром, содержащим полости. Целью представленной работы является моделирование на атомарном уровне возникновения повреждённой области в нанометровой окрестности траектории БТИ в нитриде галлия и выявление механизмов, управляющих кинетикой её формирования.

На примере облучения GaN ионами Pb 930 МэВ при комнатной температуре продемонстрировано возникновение азотных пузырьков в аморфном ядре трека. В окружающем ядро дефектном галлю формируются устойчивые краевые дислокации, препятствующие рекристаллизации аморфной области при остывании трека. Показано, что динамическое экранирование зарядов атомов мишени [7] влияет на скорость передачи энергии от возбуждённой электронной подсистемы в атомную решётку и как этот эффект сказывается на кинетике наблюдаемых структурных изменений.

Модель. Для описания формирования треков БТИ в GaN применялась мультимасштабная численная модель TREKIS+MD [3], основывающаяся на резком различии в характерных временах возбуждения материала в окрестности траектории иона и реакции атомной подсистемы на вносимое возбуждение. Монте-Карло (МК) код TREKIS-3 [8] использовался для моделирования возбуждения электронной и ионной подсистем материала с учётом ионизации атомов налетающим БТИ и генерируемыми им δ -электронами, релаксации дырок на глубоких оболочках, переноса и рассеяния образовавшихся электронов, валентных дырок и фотонов, а также передачи энергии от возбуждённой электронной подсистемы в кристаллическую решётку. Детальное описание кода TREKIS-3 и используемых в нём модельных допущений представлено в работах [3, 8].

Передача энергии атомной системе в окрестности траектории иона реализуется по двум механизмам, инициируемым возникновением экстремально неравновесного состояния электронной системы. Первый заключается в прямом обмене кинетической энергией (рассеянии) между возбуждёнными электронами и атомной системой. Наряду с быстрыми электронами в зоне проводимости при ионизации мишени возникают и незаполненные состояния в валентной зоне, которые тоже участвуют в этом обмене. Будучи транспортным кодом, TREKIS моделирует этот канал релаксации избыточной энергии валентной зоны, как рассеяние свободных валентных дырок, обладающих интегральной эффективной массой, учитывающей плотность электронных состояний в валентной зоне [9]. Второй, нетермический, механизм связан релаксацией неравновесной потенциальной энергии мишени. Этот механизм проявляется в резком ускорении атомов в результате инициированного экстремальным возбуждением электронной системы изменением межатомного потенциала и моделируется в TREKIS передачей потенциальной энергии электрон-дырочных пар, оставшихся к моменту окончания МК расчёта (100 фс) [3].

Энергии, переданные в атомную решётку результате рассеяния электронов и дырок, примерно равны и составляют в сумме примерно 50% от величины, требуемой для формирования в треке наблюдаемых структурных изменений [3]. Нетермический механизм обеспечивает передачу в атомный ансамбль недостающей доли необходимой энергии.

В результате МК-моделирования (TREKIS-3) было определено радиальное распределение кинетической энергии атомов GaN вокруг траектории иона, которое затем использовалось в качестве начального условия для МД-моделирования в программе LAMMPS [10] реакции атомной системы на вносимое возбуждение.

Межатомное взаимодействие в GaN описывалось с помощью потенциала Терсоффа–Бреннера [11]. Моделирование выполнялось для ортогональной МД-ячейки размером $25 \times 25 \times 25$ нм³ с периодическими граничными условиями. Перед основным расчётом структура GaN приводилась в равновесие при температуре 300 К в два этапа: в течение первых 10 пс использовался NPT-ансамбль при атмосферном давлении, в следующие 10 пс – NVE-ансамбль. Атомная динамика моделировалась с использованием NVE-ансамбля в течение 230 пс до полной релаксации решётки материала в треке БТИ. Боковые стенки (параллельные траектории БТИ) охлаждались до комнатной температуры с помощью термостата Берендсена [12] с временем релаксации 1000 фс. Визуальный анализ изменений структуры выполнялся в программе OVITO [13].

Сечение рассеяния и учёт динамического экранирования. В первом борновском приближении дифференциальное сечение рассеяния быстрых частиц на пространственно

и динамически связанном ансамбле можно выразить через динамический структурный фактор (ДСФ, $S(q, \omega)$), учитывающий коллективный отклик мишени на возбуждение, вносимое налетающей частицей [14]. Использование флуктуационно-диссипационной теоремы [15] позволяет выразить ДСФ рассеивающей системы через функцию потерь $\text{Im} \left(-\frac{1}{\varepsilon(q, \omega)} \right)$, где $\varepsilon(q, \omega)$ – комплексная диэлектрическая функция материала, и привести сечения рассеяния заряженных частиц в материале к следующему виду:

$$\frac{d^2\sigma}{d(\hbar q)d(\hbar\omega)} = \frac{2Z_{in}^2(v, q)Z_t^2(v, q)}{n_{sc}\pi\hbar^2v^2} \frac{e^2}{\hbar q} \left(1 - e^{-\frac{\hbar\omega}{k_b T}}\right)^{-1} \text{Im} \left(-\frac{1}{\varepsilon(q, \omega)} \right). \quad (1)$$

Здесь $\hbar\omega$ и $\hbar q$ – энергия и импульс, переданные от налетающей частицы, n_{sc} – концентрация центров рассеяния, v – скорость налетающей частицы, Z_{in} и Z_t – эффективные заряды налетающей и рассеивающей частиц, соответственно, e – заряд электрона, $\hbar$ – постоянная Планка, k_b – постоянная Больцмана, T – температура мишени. Важно, что функция потерь $\text{Im} \left(-\frac{1}{\varepsilon(q, \omega)} \right)$ может быть восстановлена на основе экспериментальных и расчётных оптических данных [16, 17]. Формула (1) применяется в коде TREKIS ко всем процессам рассеяния движущихся зарядов в среде (БТИ, электроны, валентные дырки).

В процессе ионизации изначально возникают дельта-электроны высоких энергий (до 20 кэВ). Для этих электронов, как и для налетающего иона, выполнение первого борновского приближения очевидно. Примерно к 10 фс после пролёта иона формируется бимодальное распределение горячих электронов с небольшой долей далеко улетевших и всё ещё быстрых электронов и почти термализованных электронов с энергией порядка 10 эВ на расстояниях до 1–3 нм от траектории иона. Взаимодействие “медленных” электронов происходит с экранированными зарядами. “Голый” кулоновский потенциал ионных “валентных” остовов трансформируется в короткодействующий потенциал (в грубом приближении типа Юкавы), который резко спадает по амплитуде и радиусу действия. Этот эффект качественно расширяет область применимости первого борновского приближения в сторону меньших энергий электронов (до ~ 1 эВ). Подвижность (влияние на пространственный перенос энергии) самых медленных электронов и энергия, передаваемая ими фононам, относительно невелики. Избыточная энергия этого ансамбля в основном учитывается в конце МК расчёта при передаче потенциальной энергии электрон-дырочных пар в атомную решётку. Вышесказанное справедливо и для валентных дырок.

Применимость использования первого борновского приближения в коде TREKIS подтверждается совпадением результатов расчётов с результатами экспериментов для

многих материалов [18, 19]. Это говорит о том, что это приближение обеспечивает выделение основных механизмов, управляющих структурными изменениями в треке БТИ.

Зависимость эффективного заряда БТИ от скорости иона определяется формулой Баркаса [20]:

$$Z_{in}(v) = Z_{ion} \left(1 - \exp \left(-\frac{v}{v_0} Z_{ion}^{-\frac{2}{3}} \right) \right), \quad (2)$$

где Z_{ion} – атомный номер БТИ, $v_0 = \frac{c}{125}$. В случае электронов и валентных дырок $Z_{in} = \pm 1$.

Для эффективного заряда рассеивающих атомов мишени Z_t существует несколько моделей. Приближение $Z_t = 1$ [21] априорно применялось в ранних расчётах TREKIS для диэлектриков (оксид алюминия [18] и другие оксиды). Этот заряд “снижал” валентный заряд ионных остовов и давал совпадающие с экспериментом результаты. Вторая модель устанавливает зависимость Z_t от скорости налетающей частицы соотношением, подобным формуле Баркаса [22]:

$$Z_t(v) = 1 + (Z_{at} - 1) \left(1 - \exp \left(-\frac{v}{v_0} (Z_{at} - 1)^{-\frac{2}{3}} \right) \right), \quad (3)$$

здесь формула эффективного заряда сводится к 1 для медленных электронов, а для быстрых электронов сводится к значению заряда голого атомного ядра. Формула описывает гладкий переход между двумя этими предельными случаями и имеет вид, подобный формуле Баркаса (но не совпадает с ней).

Для сравнения с этими эмпирическими моделями в представленной работе используется зависимость эффективного заряда атомов мишени Z_t от скорости налетающей частицы, учитывающая эффект динамического экранирования ядра атома валентными электронами и электронами глубоких оболочек [7]. В рамках формализма динамического структурного фактора сечение рассеяния заряженной частицы в твердом теле можно разделить на рассеяния в системе взаимодействующих между собой электронов и на рассеяния в ансамбле экранированных ионных остовов (“декомпозиция Чихары” общего ДСФ среды [23]). Динамические и пространственные корреляции в ансамбле ионных остовов, проявляющиеся при рассеянии частицы, описываются атомным ДСФ мишени. Влияние электронной системы на это рассеяние учитывается модификацией (экранировкой) заряда рассеивающих ионных остовов, которая складывается из описываемой атомным форм-фактором $f_I(\tilde{q})$ экранировки электронами глубоких оболочек ядра атома и экранировки валентными электронами, описываемой комплексной диэлектрической функцией (КДФ) среды [7]:

$$Z_t(v, q) = Z_{at} - Z_I f_I(\tilde{q}) - \rho(\omega, \tilde{q}). \quad (4)$$

Здесь f_I – форм-фактор атома, учитывающий только электроны глубоких оболочек, $Z_I = Z_{at} - N_{VB}$, N_{VB} – число электронов валентной зоны материала, приходящихся на атом, $\rho(\omega, q)$ – плотность заряда облака свободных (валентных) электронов вокруг атома, $\tilde{q} = \frac{q+q_{in}}{2}$ – *ad hoc* – параметр, учитывающий импульс q_{in} налетающей частицы и импульс q , передаваемый в атомную систему. Чем больше q_{in} (скорость налетающей частицы), тем меньше эффект экранирования атома.

Важно, что эта экранировка зависит как от скорости налетающей частицы, так и от переданного атому импульса [7, 23]. В грубой интерпретации этот эффект отражает зависимость реализующегося при столкновении механизма рассеяния от времени столкновения и прицельного параметра. Эта зависимость приводит к тому, что в течение акта рассеяния в экранировке заряда ядра не участвуют коллективные электронные моды атома-рассеивателя, формирующие атомный формфактор ионного остова и КДФ и имеющие характерные времена, меньшие времени столкновения.

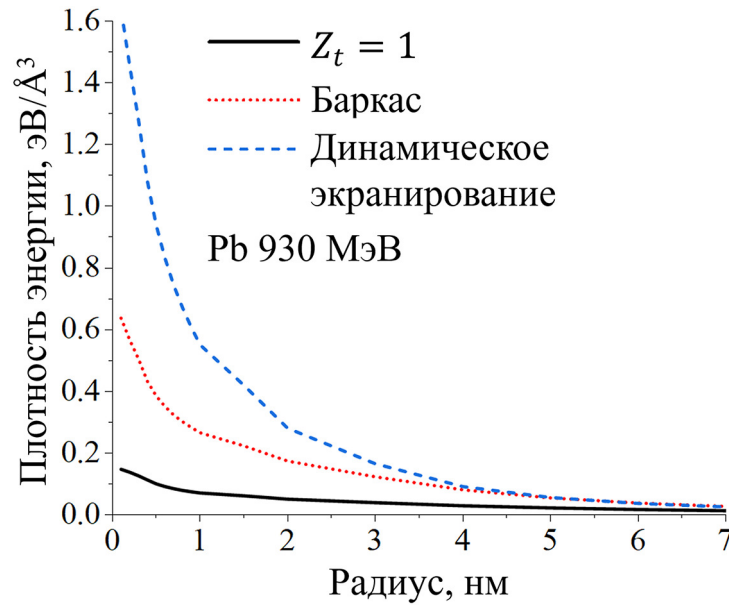


Рис. 1: Сравнение начальной плотности избыточной энергии атомов GaN вокруг траектории иона Pb 930 МэВ для разных моделей эффективного заряда рассеивающих атомов Z_t .

Результаты.

Структура и размеры треков. На рис. 1 представлены полученные с помощью модели Монте-Карло распределения плотности кинетической энергии атомов GaN к моменту 100 фс после пролёта иона свинца с энергией 930 МэВ с учётом разных моделей

эффективного заряда рассеивающих атомов: $Z_t = 1$, Баркаса и динамического экранирования.

Использование модели эффективного заряда с динамическим экранированием даёт значительно большие значения переданной в решётку энергии (на порядок выше, чем для $Z_t = 1$). Представленные на рис. 1 радиальные распределения плотности кинетической энергии атомов были использованы в качестве начальных условий для последующего МД-моделирования реакции атомного ансамбля на вносимое возбуждение, результаты которого показаны на рис. 2.

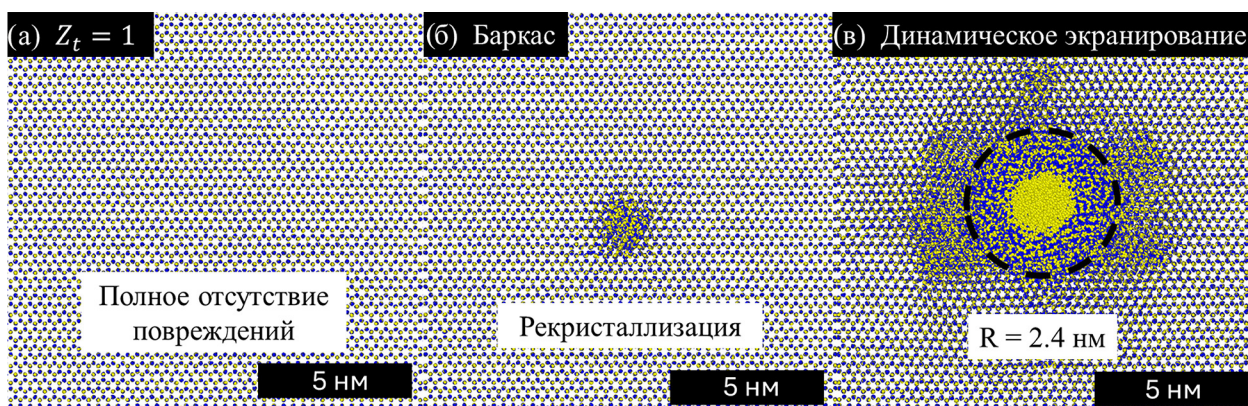


Рис. 2: Сравнение треков иона Pb 930 МэВ в GaN для разных эффективных зарядов: (a) $Z_t = 1$, (б) Баркаса, (в) динамического экранирования.

Предположение $Z_t = 1$ приводит к минимальной передаче энергии в кристаллическую решётку и не вызывает каких-либо заметных нарушений в кристаллической структуре GaN . Использование модели Баркаса приводит в итоге к почти полной рекристаллизации аморфизированного трека с остаточными повреждениями, расположенными вдоль траектории иона. Учёт динамического экранирования формирует цилиндрический трек с аморфным ядром радиусом 2.4 нм, совпадающим с экспериментальным значением (2.4 нм, рис. 2 в работе [4]), а также соответствует результатам моделирования с использованием двухтемпературной модели (ТТМ+МД) (2.2 нм, см. рис. 2(b) в работе [6]). Аморфное ядро содержит заполненные азотом пузырьки, (рис. 3) также наблюдавшиеся и при ТТМ+МД [5, 6] моделировании.

Учитывая совпадение с экспериментом, можно заключить, что наиболее подходящим подходом для определения эффективного заряда атомов-рассеивателей при описании формирования треков ионов 930 МэВ Pb в нитриде галлия является модель динамической экранировки.

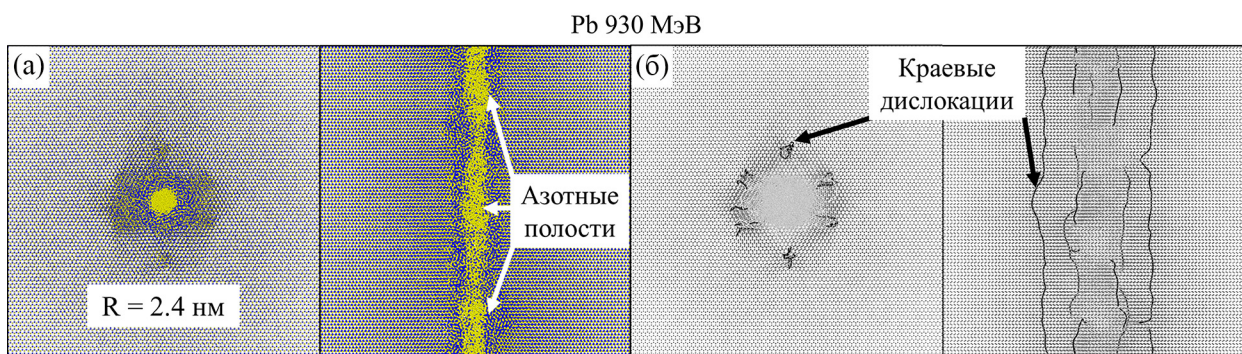


Рис. 3: (а) Размер и структура трека и (б) краевые дислокации окружающей ядро иона Pb 930 МэВ в GaN.

Дефекты решётки вокруг ядра трека. Эволюция структуры трека иона Pb 930 МэВ в GaN проходит в две стадии. Первоначально (до 10 пс после пролёта БТИ) вокруг траектории иона формируется нагретая (расплавленная) аморфная структура. Впоследствии эта разупорядоченная область сужается из-за рекристаллизации [24], и в течение ~ 100 пс вокруг аморфного ядра трека образуется сильно повреждённое, но кристаллическое гало. Для изучения структуры гало применялся алгоритм извлечения дислокаций (DXA) [25], реализованный в программе OVITO [13]. На рис. 3 показаны дефекты кристаллической решётки в GaN, образовавшиеся после прохождения иона Pb с энергией 930 МэВ. Обозначенные чёрными линиями краевые дислокации, протяжённые вдоль траектории БТИ, расположены в вершинах шестиугольника, в которых реализовывались максимальные напряжения в возбуждённом материале. Аналогичные дефекты наблюдались для иона Au в работе [5]. По всей видимости, возникновение этих краевых дислокаций на горячей стадии формирования трека препятствует процессу полной рекристаллизации его аморфного ядра при остывании повреждённой области.

Заключение. Проведено моделирование образования треков ионов Pb с энергией 930 МэВ в GaN. Показана важность учёта в этом материале эффекта динамического экранирования заряда атомов при описании рассеяния электронов на атомной решётке. Полученные в результате моделирования треки обладают аморфным ядром, радиус которого совпадает с наблюдаемым в эксперименте. В ядре трека образуются заполненные азотом пузырьки. Дефектное кристаллическое гало вокруг ядра трека содержит краевые дислокации, возникающие в углах шестиугольника, который очерчивают форму первично аморфизированной области. Предполагается, что эти протяжённые вдоль траектории иона дислокации препятствуют полной рекристаллизации аморфного ядра

при остывании трека.

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/>.

Л И Т Е Р А Т У Р А

- [1] B. D. Weaver et al., ECS J. Solid State Sci. Technol. **5**(7), Q208 (2016). DOI: 10.1149/2.0281607JSS.
- [2] H. Zhang et al., Micro and Nanostructures **213**, 208620 (2026). DOI: 10.1016/J.MICRNA.2026.208620.
- [3] N. Medvedev et al., J. Appl. Phys. **133**(10), 100701 (2023). DOI: 10.1063/5.0128774.
- [4] M. Sall et al., J. Mater. Sci. **50**(15), 5214 (2015). DOI: 10.1007/S10853-015-9069-Y.
- [5] M. C. Sequeira et al., Commun. Phys. **4**(1), Dec. (2021). DOI: 10.1038/S42005-021-00550-2.
- [6] M. C. Sequeira et al., Small **18**(49), Dec. (2022). DOI: 10.1002/SMLL.202102235.
- [7] N. Medvedev, D. I. Zainutdinov, A. E. Volkov, J. Appl. Phys. **137**(1), 15903 (2025). DOI: 10.1063/5.0242080/3329165.
- [8] N. A. Medvedev, R. A. Rymzhanov, A. E. Volkov, J. Phys. D. Appl. Phys. **48**(35), 355303 (2015). DOI: 10.1088/0022-3727/48/35/355303.
- [9] B. Y. Mueller, B. Rethfeld, Phys. Rev. B **87**(3), 035139 (2013). DOI: 10.1103/PhysRevB.87.035139.
- [10] A. P. Thompson et al., Comput. Phys. Commun. **271**, Feb. (2022). DOI: 10.1016/J.CPC.2021.108171.
- [11] J. Nord, K. Albe, P. Erhart, K. Nordlund, J. Phys. Condens. Matter **15**(32), 5649 (2003). DOI: 10.1088/0953-8984/15/32/324.
- [12] H. J. C. Berendsen, J. P. M. Postma, W. F. Van Gunsteren, et al., J. Chem. Phys. **81**(8), 3684 (1984). DOI: 10.1063/1.448118.
- [13] A. Stukowski, Model. Simul. Mater. Sci. Eng. **18**(1), 015012 (2009). DOI: 10.1088/0965-0393/18/1/015012.
- [14] L. Van Hove, Phys. Rev. **95**(1), 249 (1954). DOI: 10.1103/PhysRev.95.249.
- [15] R. Kubo, Reports Prog. Phys. **29**(1), 255 (1966). DOI: 10.1088/0034-4885/29/1/306.
- [16] S. Adachi, Opt. Constants Cryst. Amorph. Semicond. (1999). DOI: 10.1007/978-1-4615-5247-5.
- [17] B. L. Henke, E. M. Gullikson, J. C. Davis, At. Data Nucl. Data Tables **54**(2), 181 (1993). DOI: 10.1006/ADND.1993.1013.
- [18] R. A. Rymzhanov, N. Medvedev, A. E. Volkov, J. Phys. D. Appl. Phys. **50**(47), 475301 (2017). DOI: 10.1088/1361-6463/AA8FF5.

- [19] D. I. Zainutdinov et al., J. Alloys Compd. **1013**, no. January, 1 (2024). DOI: 10.1016/j.jallcom.2025.178524.
- [20] W. H. Barkas, “Nuclear Research Emulsions: Particle behavior and emulsion applications, edited by DA Evans,” vol. 15, 1963.
- [21] J. C. Kuhr, H. J. Fitting, J. Electron Spectros. Relat. Phenomena **105**(2-3), 257 (1999). DOI: 10.1016/S0368-2048(99)00082-1.
- [22] N. Medvedev, F. Akhmetov, R. A. Rymzhanov, et al., Adv. Theory Simulations **5**(8), 2200091 (2022). DOI: 10.1002/ADTS.202200091.
- [23] J. Chihara, J. Phys. Condens. Matter **12**(3), 231 (1999). DOI: 10.1088/0953-8984/12/3/303.
- [24] R. A. Rymzhanov, N. Medvedev, J. H. O’Connell, et al., Sci. Rep. **9**(1), 3837 (2019). DOI: 10.1038/s41598-019-40239-9.
- [25] A. Stukowski, V. V. Bulatov, A. Arsenlis, Model. Simul. Mater. Sci. Eng. **20**(8), Dec. (2012). DOI: 10.1088/0965-0393/20/8/085007.

Поступила в редакцию 26 апреля 2026 г.

После доработки 26 июля 2026 г.

Принята к публикации 27 июля 2026 г.