Письма в ЭЧАЯ. 2025. Т. 22, № 5(262). С. 1010

ФИЗИКА ТВЕРДОГО ТЕЛА И КОНДЕНСИРОВАННЫХ СРЕД

X-RAY DIFFRACTION STUDY AND MODELING OF DAMAGED LAYERS IN $Y_{2.5}Nd_{0.5}Al_5O_{12}$ CERAMICS AFTER SWIFT HEAVY Xe IONS IRRADIATION

A. A. Nazarov[a,1], *P. A. Yunin*[a], *L. S. Alekseeva*[b], *A. V. Nokhrin*[b]

[a] Institute for Physics of Microstructures, RAS, Afonino, 607680, Russia

[b] Lobachevsky State University of Nizhny Novgorod, Nizhny Novgorod, 603022, Russia

The paper presents a multiscale modeling of defect formation and latent track generation processes under irradiation of neodymium-doped yttrium–aluminum garnet ceramics with xenon swift heavy ions. The structural characteristics of the material before and after interaction with Xe ions are calculated, and the sizes of the amorphized region of the crystalline matrix are estimated. The theoretical X-ray diffraction pattern is calculated and compared with the experimental one. Good qualitative and quantitative agreement between the calculation results and the experiment is demonstrated, and an interpretation of the X-ray diffraction data is proposed based on the results of molecular dynamics modeling.

Представлено многомасштабное моделирование процессов дефектообразования и формирования латентных треков при облучении керамики иттрий-алюминиевого граната, легированной неодимом, быстрыми тяжелыми ионами ксенона. Рассчитаны структурные характеристики материала до и после взаимодействия с ионами Xe, оценены размеры аморфизованной области кристаллической матрицы. Рассчитана теоретическая рентгеновская дифракционная картина ячейки моделирования, и проведено ее сравнение с экспериментальной. Показано хорошее качественное и количественное согласие между результатами расчета и эксперимента, предложена интерпретация рентгенодифракционных данных на основе результатов молекулярно-динамического моделирования.

PACS: 61.05.cp

Received on April 7, 2025.

[1] E-mail: nazarov.artem@ipmras.ru