

01;10

## Аномалии многократного рассеяния заряженных частиц в толстом кристалле

© А.Г. Кадменский, А.Ф. Тулинов

ФГУП „ЦНИИ машиностроения“, Королев Московск. обл.

E-mail: Akadm@rambler.ru

НИИЯФ им. Д.В. Скобельцына МГУ им. М.В. Ломоносова

*Поступило в Редакцию 3 сентября 2003 г.**В окончательной редакции 23 декабря 2003 г.*

Рассматривается динамика каналирования заряженных частиц в кристалле атомных цепочек. Многократное рассеяние заряженных частиц вводится методом интегрирования по траектории и вызывает переходы между динамическими модами [1,2] осевого каналирования, причем двойное каналирование является стоком для нормального. В условиях случайного движения наблюдается объемное реканалирование. В этом случае на глубине нормального пробега до  $\sim 20\%$  упавших на кристалл частиц движутся в режиме каналирования, причем значительная часть — в режиме двойного каналирования.

1. Исследование динамики быстрых положительно заряженных частиц и ионов (далее — частиц) [1,2] в модельном кристалле, составленном из атомных цепочек Линдхарда [3], показало существование регулярного движения в непрерывном поперечном потенциале при начальных условиях, соответствующих малым углам падения одновременно относительно кристаллографической оси  $z$  (полярный угол  $\theta_0$ ) и относительно атомной плоскости, ее содержащей (азимутальный угол  $\varphi_0$ ). Поскольку при этом автокорреляционная функция (АКФ) для поперечных импульсов частиц не затухала с пройденным расстоянием, можно говорить о новом устойчивом режиме, похожем на каналирование между рядами атомных цепочек (т.е. атомными плоскостями как „цепочками атомных цепочек“ в терминах Линдхарда). Этот режим был назван режимом двойного каналирования (ДК).

При других начальных условиях, соответствующих тем же  $\theta_0$ , но увеличенным углам  $\varphi_0$  (характерное значение 0.3–0.4), АКФ быстро затухала с толщиной  $z$ , при этом немонотонно, в отличие от ее поведения для модельной среды „газа“ атомных цепочек [3,4]. Одновременно наблюдалось быстрое азимутальное расширение потока и заполнение

(неоднородное!) характерного для каналирования азимутального кольцеобразного распределения со средним значением поперечного импульса, быстро приближающимся к нулю. Такие свойства постулировались в гипотезе Линдхарда [3] для всего потока каналированных частиц, поэтому этот режим назван режимом „нормального каналирования“ (НК). Оба режима существенно отличались от описания каналирования в рамках модели статистического равновесия [3], демонстрируя аномальные значения темпа многократного рассеяния (превышения до двух раз для НК статистически равновесных значений и ослабления приблизительно такого же уровня для ДК) [2]. Резко контрастируют они также с положениями статистической теории каналирования, основанной на цепочке уравнений Боголюбова–Борна–Грина–Кирквуда–Ивона.

При  $\varphi_0 = 0$  режим ДК соответствует известному из эксперимента поведению при переходе „ось–плоскость“ при каналировании (см., например, [6]), а наблюдаемые для него при определенных начальных полярных углах  $\theta_0$  резкие провалы числа частиц, прошедших тонкий кристалл, — так называемому резонансному деканалированию. При других азимутах  $\varphi^{cr} > \varphi_0 > 0$  [2] в поведении частиц ДК также наблюдаются резонансные особенности в зависимости от  $\theta_0$ , причем даже более резко выраженных, чем при  $\varphi_0 = 0$ . Двумерность движения и области существования в поперечном пространстве и наличие резонансных особенностей отличают режим ДК от широко известного плоскостного каналирования.

В этой заметке мы обсудим влияние эффектов многократного рассеяния на поведение пучка каналированных частиц в кристалле.

2. Для включения эффекта многократного рассеяния частиц на ядрах с учетом колебаний решетки при заданной температуре  $T$  использовались расчеты среднего квадрата полярного угла рассеяния частицы относительно оси канала на траектории с заданными инвариантами движения в поле атомной цепочки (АЦ) — безразмерной поперечной энергией  $\varepsilon_{\perp}$  и моментом поперечного движения (определяемого прицельным параметром  $b_{\perp}$  столкновения частицы с АЦ). В рамках метода интегрирования по траектории [5] для ядерного рассеяния

$$\Omega_n^2(\varepsilon_{\perp}, b_{\perp}, u_{\perp}) = \left\{ \frac{\delta \Omega_n^2}{\delta z} \right\}_R m_{\Omega n} \Delta z;$$

$$m_{\Omega n} = \frac{\langle \Delta z \rangle}{\Delta z} \left[ \eta_1 \frac{9u_{\perp}^2 a_{TF}^2}{L_n} (p_1 + p_2 + p_3) + \frac{2r_0 \eta_2}{\sqrt{\pi u_{\perp}^2}} \exp\left(-\frac{b_{\perp}^2}{u_{\perp}^2}\right) \right], \quad (1)$$

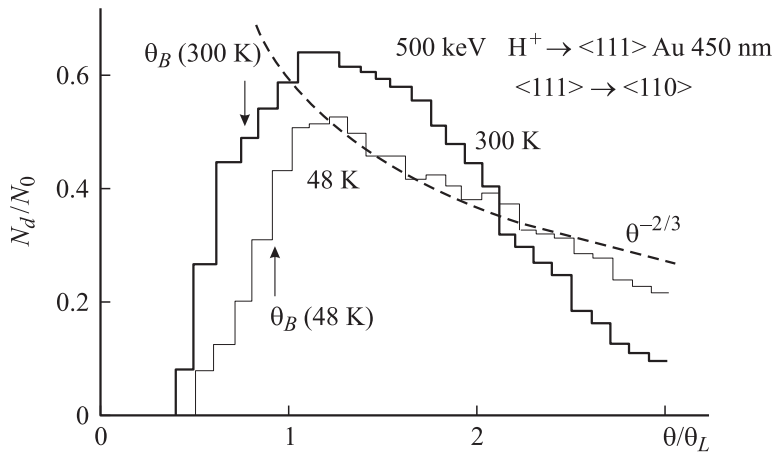
$$p_1 = \frac{2r_{mb}^2 + 3a_{TF}^2 + 3r_{mb}^2 R_c}{2R_c^3 r_{mb}^3 (r_{mb} + R_c)^3}, \quad p_2 = \frac{11r_{mb}^2 + 24a_{TF}^2 + 9r_{mb}^2 R_c}{4R_c^5 r_{mb} (r_{mb} + R_c)^3},$$

$$p_3 = \frac{5}{8R_c^7}; \quad R_c = r_{mb}^2 + 3a_{TF}^2,$$

где  $u_{\perp}$  — среднеквадратичная амплитуда поперечных колебаний атомов кристалла при температуре  $T$ ;  $\{\delta\Omega_n^2/\delta z\}_R$  — средний темп многократного ядерного рассеяния ионов в режиме случайного движения (random) в кристалле;  $a_{TF}$  — длина Томаса–Ферми;  $\Delta z$  — длина взаимодействия иона с АЦ вдоль ее оси  $z$ . Величина  $m_{\Omega_n}$  записана в виде суммы вкладов многоатомного и одноатомного механизмов рассеяния частицы в кристалле соответственно; при этом  $\eta_1(r_m) = 1 - \eta_2(1 + r_m^2/u_{\perp}^2)$ ;  $\eta_2 = \exp(-r_m^2/u_{\perp}^2)$ . Расстояние наибольшего приближения иона  $r_m(\varepsilon_{\perp})$  к оси АЦ при  $b_{\perp} = 0$  для непрерывного потенциала АЦ в форме Линдхарда при учете его зануления на границе ячейки Вигнера–Зейтца (т.е. при  $r_{\perp} = r_0 = 1/\sqrt{\pi N d}$ ,  $N$  — атомная плотность кристалла,  $d$  — период исследуемой АЦ, когда поперечная энергия  $\varepsilon_{\perp} = \varepsilon_{\perp 0} = 2\theta_0^2/\theta_L^2$ ,  $\theta_L \equiv \psi_1$  — критический угол Линдхарда [3]) определяется

$$r_m^2(\varepsilon_{\perp}) = \frac{3a_{TF}^2}{\beta \exp(\varepsilon_{\perp}) - 1}, \quad \beta \approx 1 + \frac{3a_{TF}^2}{r_0^2}. \quad (2)$$

В [5] приведены аналогичные формулы для учета электронного торможения и многократного рассеяния, характеризуемого  $\Omega_e^2$ , в зависимости от интегралов траектории. Они, как и (1), были проверены отдельным моделированием рассеяния частиц изолированной АЦ кристалла методом бинарных столкновений с его атомами и показали приемлемую точность при варьировании входящих в них параметров в широких пределах. В следующих далее расчетах реализация случайного угла многократного рассеяния осуществлялась при допущении, что введенные выше средние квадраты углов служат слагаемыми при вычислении дисперсии  $\Omega^2 = \Omega_n^2 + \Omega_e^2$  нормального гауссовского шума для розыгрыша случайного углового отклонения от траектории частицы в непрерывном потенциале. В [5] показано, что она служит так называемой фрактальной траекторией (в терминах Мигдала, см. в [6]). Вместе с угловым отклонением рассматривалось и случайное пространственное отклонение при многократном рассеянии частиц в соответствии с формулой Ферми (также см. в [6]), что вместе с (1) учитывалось в моменты перехода частиц из одной ячейки Вигнера–Зейтца в другую.



**Рис. 1.** Угловая зависимость числа частиц в режиме двойного каналирования  $\langle 111 \rangle \rightarrow \langle 110 \rangle$  для протонов с энергией 500 keV в кристалле Au толщиной 450 nm при температурах 48 K (тонкая линия) и 300 K (толстая линия). Стрелками показаны граничные углы Барретта, зависящие от температуры. Зависимость  $\varphi^{cr} \sim \theta^{-2/3}$  справедлива для динамики в режиме двойного каналирования [2].

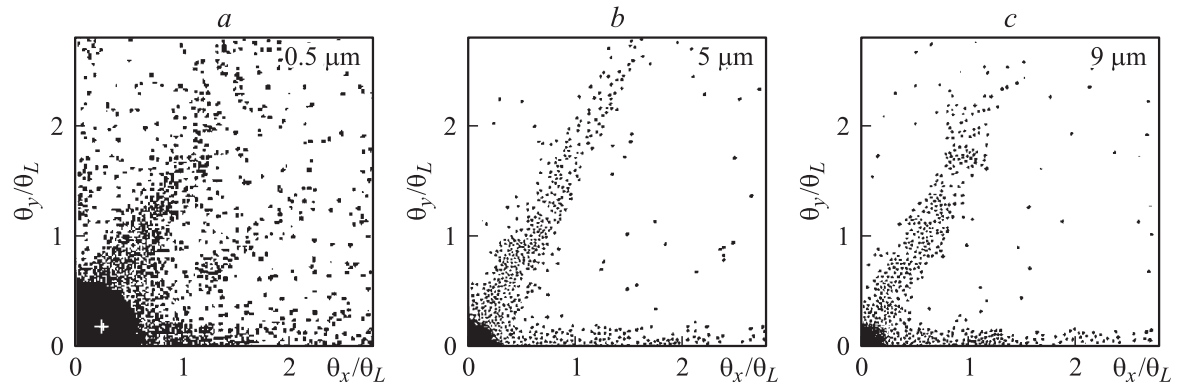
Упругое рассеяние частицы в непрерывном потенциале описывалось аналитически [5] как вращение вокруг оси АЦ (изменение азимутального угла с сохранением поперечной энергии частицы  $\varepsilon_{\perp}$ ). Это позволяло проводить моделирование транспорта частиц в кристалле в используемом приближении бинарных столкновений частиц с АЦ со значительной скоростью, позволяющей рассматривать „толстые“ кристаллы, т.е. соизмеримые по толщине с нормальным проецированным пробегом  $R_p$ .

3. Расчеты с изменением температуры в кристалле Au толщиной 450 nm для протонов с энергией 500 keV в осевом канале  $\langle 111 \rangle$  показали (рис. 1), что в широком диапазоне начальных полярных углов число частиц, отобранных из всего потока как движущихся в режиме двойного каналирования при температуре 300 K, значительно превышает число частиц ДК при 48 K, т.е. повышение температуры кристалла способствует переходам между режимом нормального каналирования и режимом двойного каналирования. Такие переходы,

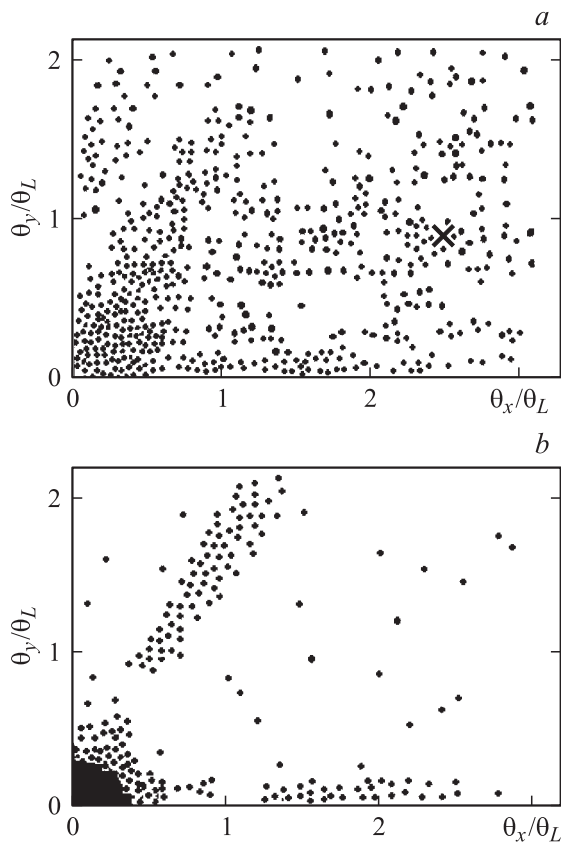
которые назовем объемным реканалированием в режим двойного каналирования, проявляются при движении частиц на всех исследованных глубинах кристаллов, существенно изменяя существующий сценарий деканалирования.

В качестве примера приведем эволюцию угловых распределений протонов с начальной энергией 1.0 MeV в осевом канале  $\langle 111 \rangle$  Au при температуре 300 K, упавших на кристалл в пределах области осевого каналирования, но вне области режима двойного каналирования ( $\theta_0 = 0.32\theta_L$ ,  $\varphi_0 \sim 0.4$ ). На рис. 2 показана последовательность двумерных угловых распределений для увеличивающихся толщин пройденного слоя, представленных четвертой частью. Начало координат на рисунках соответствует направлению оси  $\langle 111 \rangle$ . Наряду со сверхканалированием и нормальным каналированием (пятно вблизи начала координат) присутствует режим двойного каналирования вблизи плоскостей  $\{110\}$ , наблюдаемых под азимутальными углами  $\varphi = \text{arctg}(\theta_y/\theta_x)$  0 и  $60^\circ$ . Проявление плоскостей  $\{211\}$ , наблюдаемое в распределении на относительно малой глубине  $0.5\mu\text{m}$  под азимутальными углами  $30$  и  $90^\circ$ , на больших глубинах уже отсутствует. По мере увеличения толщины, вплоть до  $1.5R_p$  ( $R_p = 5.5\mu\text{m}$  [7]), наблюдаются угловая диффузия и увеличение средней поперечной энергии частиц, их деканалирование (в терминах существующей статистической теории) и останов, а также новое явление — появление и накопление частиц в режиме двойного каналирования вблизи сильной плоскости, включая и частицы, движущиеся с большими  $\theta > \theta_L$  углами.

На рис. 3 приведен другой пример для протонов с энергией 2 MeV вблизи направления  $\langle 111 \rangle$  вольфрама для начальных условий  $\varepsilon_{\perp 0} \sim 8$ , что, согласно существующей теории, соответствует режиму неуправляемого кристаллической решеткой движения. Интерес представляет эффект сверхсильного рассеяния (рис. 3, *a*), получивший интерпретацию в рамках модели статистического равновесия в [8], а также при выходе за ее рамки в виде свойств нормального каналирования при больших поперечных энергиях [2]. Одновременно на толщинах порядка трети пробега заметно заселение каналированных состояний, причем наряду с хорошо каналированными частицами в значимом количестве присутствуют частицы в режиме двойного каналирования. На больших глубинах ( $\sim R_p$ ) суммарное число частиц в состоянии каналирования составляет около 20% от упавших, что соответствует экспериментальному распределению остановившихся ионов при имплантации бора в случайном направлении в кремний [9]. Дополнительно



**Рис. 2.** Фрагменты угловых распределений протонов с начальной энергией 1.0 MeV в монокристалле золота при температуре 300 К ( $\theta_0 = 0.32\theta_L$  к оси  $\langle 111 \rangle$  и  $\varphi_0 = 20^\circ$  к плоскости (110), на различных глубинах ( $\mu\text{m}$ ):  $a$  — 0.5;  $b$  — 5,  $c$  — 9. Направление падения пучка указано значком + ( $a$ ). Статистика  $N_0 = 9000$ ).



**Рис. 3.** Фрагменты двумерных угловых распределений протонов с начальной энергией 2 MeV в монокристалле вольфрама при комнатной температуре на различных глубинах,  $\mu\text{m}$ : 1 (*a*), 20 ( $\sim 1.4R_p$  [10]) (*b*). Направление падения пучка указано значком  $\times$  (*a*), что соответствует безразмерной энергии  $\varepsilon_{\perp 0} = 2\theta_0^2/\theta_L^2 \sim 8$ . Статистика  $N_0 = 3000$ .

отметим, что на сверхбольших глубинах  $1.5R_p$  (рис. 3, *b*) наблюдается исключительно каналированная фракция в различных режимах, причем в окрестности углов резонансного деканалирования наблюдается четкий провал в заселении режима ДК в угловой окрестности атомной плоскости.

Существование перехода из случайного режима движения в режимы каналирования принципиальным образом отличает случайный режим движения в кристалле (так называемый „рэндом“) от движения частиц в аморфном теле и является дополнительным к отмеченному выше проявлением объемного реканалирования. Его существование подтверждается экспериментально данными по профилям рэндом — имплантации ионов при легировании полупроводников (см., например, [9]), где наблюдались так называемые „сверххвосты“ по сравнению с аморфной мишенью в распределениях остановившихся ионов по глубине, которые, однако, традиционно объясняются радиационно-стимулированной диффузией примесных атомов.

Отметим также, что чисто плоскостное каналирование практически не возмущается при исследовании динамики каналирования в кристалле АЦ. Однако наблюдается значительное увеличение (в случае Au почти в два раза) заселенности угловой окрестности атомной плоскости при приближении направления падения потока к направлению кристаллографической оси, т.е. в режиме ДК. Это явление может увеличить „светосилу“ изогнутого монокристалла при повороте частиц высокой энергии, где используется управляющее воздействие атомными плоскостями (см., например, [10]).

Важный вывод заключается в том, что объемное реканалирование в прямом кристалле связано с нелинейной динамикой частиц в кристалле и инициировано процессами рассеяния частиц на ядрах колеблющихся атомов кристалла (а также дефектах), при этом происходит тем интенсивнее, чем выше температура. Это отличает его от изученного и используемого при проведении экспериментов с релятивистскими пучками объемного захвата расходящегося по углу пучка в режим каналирования в изогнутом кристалле [11,12].

Таким образом, компьютерное моделирование представляет доказательство важности переходов между модами: нормальное каналирование — двойное каналирование, случайное движение — двойное каналирование и сверхканалирование. Эти переходы имеют экспериментальное подтверждение в виде так называемых каналированных звезд, наблюдаемых за тонким кристаллом, известных давно [13], но до сих пор не имевших объяснения. В еще большей мере они подтверждаются экспериментами с неколлимированным пучком релятивистских частиц [14], характерные распределения которых близки к тем, что приведены на рис. 2, 3, *b*.



Объемный захват частиц в режим двойного каналирования, наблюдаемый в приведенных выше расчетах и на экспериментальных распределениях [14] может пролить новый свет на эффект Сумбаева [12]. На этих явлениях мы остановимся подробнее в другом месте.

В заключение один из авторов (А. Г. Кадменский) выражает благодарность за любезное приглашение на Зимнюю 2003 г. школу ПИЯФ РАН и плодотворные дискуссии с сотрудниками Лаборатории нейтронной физики и персонально В.А. Гордееву и В.В. Федорову.

## Список литературы

- [1] *Кадменский А.Г., Лебедев Н.Ю., Тулинов А.Ф.* и др. // Тр. XI Всесоюз. совещ. по физике взаимодействия заряженных частиц с кристаллами. М.: Изд-во Моск. ун-та, 1982. С. 50.
- [2] *Кадменский А.Г., Тулинов А.Ф.* // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. 2004. № 2. С. 43–52.
- [3] *Lindhard J.* // Kgl. Dan. Vid. Selsk. Mat.-Fys. Medd. 1965. V. 34. N 14. (Пер.: УФН. 1969. Т. 99. С. 249–296).
- [4] *Vulgakov Iu.V.* // VII ICACS. Moscow, sept. 19–23, 1977. Proceedings. M.: MSU Publ. House, 1981. V. 1. P. 41–44.
- [5] *Кадменский А.Г., Самарин В.В.* // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. 2002. № 5. С. 98–110.
- [6] *Ахиезер А.И., Шульга Н.Ф.* Электродинамика высоких энергий в веществе. М.: Наука, 1993. 344 с.
- [7] *Janny J.F.* // Atomic Data and Nuclear Data Tables. 1982. V. 27. P. 341–529.
- [8] *Кадменский А.Г.* // ФизХОМ. 2004. № 2.
- [9] *Wilson R.G.* // J. Appl. Phys. 1983. V. 54. P. 6879.
- [10] *Ахиезер А.И., Шульга Н.Ф., Трутень В.И.* и др. // УФН. 1995. Т. 165. № 10. С. 1165–1192.
- [11] *Андреев В.А., Баублис В.В., Дамаскинский Е.Ф.* и др. // Письма в ЖЭТФ. 1982. Т. 36. № 9. С. 340–343.
- [12] *Сумбаев О.И.* // ЖЭТФ. 1987. Т. 57. С. 2067–2077.
- [13] *Dearnaley G., Farmery B.W., Mitchell I.V., Nelson R.S., Thompson M.W.* // Phil. Mag. 1968. V. 18. P. 985–1016.
- [14] *Esbensen H., Fich O., Golovchenko G.A., Madsen S.* et al. // Phys. Rev. B. 1978. V. 18. N 5. P. 1038–1054.