

10

Особенности угловых распределений многозарядных ускоренных ионов в ориентированных кристаллах

© *В.С. Малышевский, С.В. Рахимов*

Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону

E-mail: gvidon@aaanet.ru

В окончательной редакции 6 февраля 2007 г.

На основе кинетической теории дана интерпретация недавно обнаруженных особенностей прохождения многозарядных каналированных ионов через кристаллы с различной энергией. Показано, что переход от эффекта „охлаждения“ к „нагреву“ изотропного пучка тяжелых многозарядных ионов зависит не только от энергии ионов, но и от глубины их проникновения в кристалл. Предсказан эффект автомодельности угловых распределений при прохождении многозарядных ионов через тонкие ориентированные кристаллы. Согласно с экспериментальными данными достигается при предположении, что при высоких энергиях ионов вероятность захвата электрона каналированным ионом подавлена по отношению к вероятности потери. Обсуждается возможность экспериментального измерения парциальных угловых распределений и зависимости вероятностей захвата и потери электронов от поперечного импульса и прицельного параметра при взаимодействии ионов с атомными цепочками.

PACS: 61.85.+p, 34.70.+e, 34.20.Cf, 34.10.+x

В недавних работах (см., например, [1] и приведенные там ссылки) было обнаружено, что прохождение тяжелых ионов через ориентированные кристаллы сопровождается проявлением ряда эффектов, нарушающих изотропность углового распределения первоначально изотропного пучка. Экспериментальное исследование угловых распределений

при прохождении многозарядных ионов через различные кристаллы показало существование так называемых эффектов „охлаждения“ или „нагрева“ пучка ионов, движущихся вдоль кристаллографических направлений. Причем проявление того или иного эффекта зависит не только от типа мишени, но и от энергии ионов. Гипотеза о значительном влиянии эффектов перезарядки ионов на особенности их прохождения через ориентированные кристаллы была высказана в работе [1].

Влияние перезарядки на каналирование тяжелых ионов с использованием кинетической теории впервые исследовалось в [2]. Система кинетических уравнений для функции распределения $f_0(\mathbf{p}, z)$ каналированных ионов в зарядовом состоянии Q , описывающая диффузию и перезарядку в пространстве поперечных импульсов $\{\mathbf{p}\}$ на глубине проникновения z в одноэлектронном приближении позволяет исследовать эволюцию зарядовых состояний ионов при их движении вдоль кристаллографических направлений и рассчитывать угловые распределения каналированных ионов. В данной работе проведен численный анализ кинетических уравнений [2], что дало возможность выявить новые закономерности в прохождении многозарядных ионов через ориентированные кристаллы и показать возможность экспериментального определения зависимости вероятности захвата электрона ионом от прицельного параметра.

В соответствии с условиями экспериментов [1] начальное угловое распределение задавалось изотропным распределением по поперечным импульсам. Начальное распределение по зарядовым состояниям задавалось распределением Пуассона вблизи равновесного значения $Q = Q_0$ [3]. Граничное условие, учитывающее процесс возврата частиц из хаотической компоненты пучка в режим каналирования, задавалось в виде $f_Q(\mathbf{p}_b, z) = 0$, где \mathbf{p}_b — „граничный“ импульс, значение которого больше критического \mathbf{p}_c . Расчеты проводились для изотропных пучков многозарядных ионов Al и Y, каналированных в кристалле кремния вдоль оси $\langle 100 \rangle$ (см. таблицу).

На рис. 1 показаны относительные (т.е. нормированные на хаотическую компоненту выхода) угловые распределения каналированных ионов Al для различных энергий и глубин проникновения в кристалл. Результирующее угловое распределение прошедших кристалл ионов формируется всеми парциальными (т.е. с заданными значениями заряда Q) распределениями. Суммарное распределение для ионов с энергией 48 MeV при малых значениях поперечного импульса превышает выход при неориентированном прохождении через кристалл

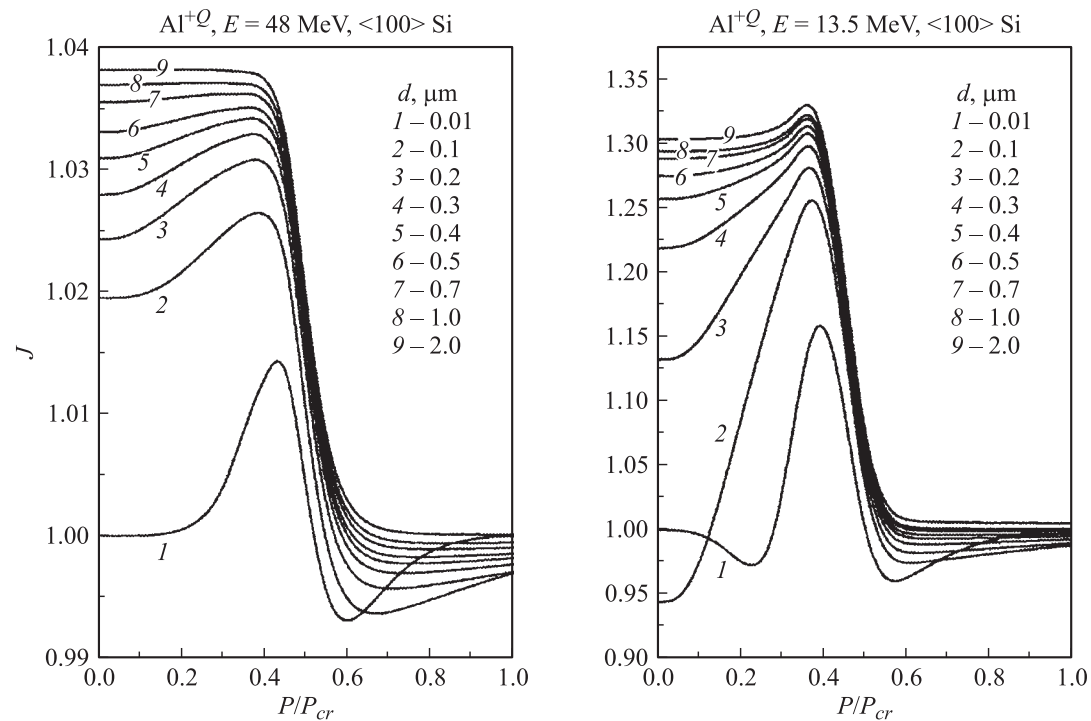


Рис. 1. Рассчитанные угловые распределения изотропного пучка ионов Al с энергией 48 и 13.5 MeV, прошедших кристалл кремния вдоль оси $\langle 100 \rangle$ в зависимости от толщины кристалла (P_{cr} — критический импульс для ионов с максимальным зарядом $Q = 13$).

Используемые в расчетах значения параметров

Ион	E , MeV	Q_0 , [11]	α	r_c , Å	r_l , Å	Примечание
Al	13.5	8	0.8	0.38	0.17	$r_c > r_l$
Al	48	10	0.5	0.20	0.30	$r_c < r_l$
Y	63	19	0.2	0.25	0.10	$r_c > r_l$
Y	177	24	0.1	0.10	0.25	$r_c < r_l$

(эффект „охлаждения“). Для ионов с энергией 13.5 MeV рассчитанное суммарное распределение имеет более сложную структуру. На малых глубинах проникновения выход в нуле меньше, чем при неориентированном движении ионов в кристалле (эффект „нагрева“). С увеличением глубины проникновения возникают некоторые особенности. Во-первых, при энергии ионов 13.5 MeV на глубине проникновения больше $0.1 \mu\text{m}$ происходит переход от эффекта „нагрева“ к эффекту „охлаждения“. Во-вторых, начиная с глубины порядка $0.5 \mu\text{m}$ в обоих случаях (как при энергии 48 MeV, так и при 13.5 MeV) относительные угловые распределения практически не изменяются, т.е. обнаруживают свойство автомодельности.

Для объяснения обнаруженных особенностей угловых распределений проведем качественный анализ свойств кинетического уравнения. Без последнего „балансового“ члена уравнение имеет вид уравнения непрерывности (подробнее см. в [2]), в котором первые три слагаемых в правой части имеют вид дивергенции плотности „обобщенного“ тока. Решение такого уравнения не нарушает изотропности первоначально-изотропного углового распределения пучка ионов. Нарушение изотропности вызвано последним „балансовым“ слагаемым. Как следует из численных оценок, характерная глубина, на которой начинает сказываться диффузия в пространстве поперечных импульсов, по порядку величины равна $z_D \simeq p_c^2/D_Q$ и составляет примерно $z_D \sim 10^{-1} \mu\text{m}$ (где D_Q — коэффициент диффузии). С другой стороны, характерную глубину, на которой „балансовый“ член выйдет на стационарный режим, можно оценить соотношением $z_C \simeq 1/W_{Q-1,Q}^{c,l}$ (где $W_{Q-1,Q}^{c,l}$ — отнесенная к единице глубины вероятность захвата (потери) электрона), которое даст оценку $z_C \sim 10^{-3} - 10^{-2} \mu\text{m}$. Таким образом, имеет место неравенство $z_C \ll z_D$, которое и объясняет обнаруженное свойство автомодельности угловых распределений в тонких кристаллах. А именно,

автомодельность связана с достижением на глубинах z_C стационарного режима последнего „балансового“ члена. Диффузия лишь сглаживает картину углового распределения, но глубина еще недостаточна для ее существенного влияния на перераспределение потока частиц в канале. Из вышеизложенного следует, что для тонких кристаллов, для которых $z_C < z < z_D$, хорошим приближением для расчета угловых распределений может служить более простое уравнение:

$$\frac{\partial f_{\varrho}(\mathbf{p}, z)}{\partial z} = W_{\varrho+1, \varrho}^c(\mathbf{p})f_{\varrho+1}(\mathbf{p}, z) - W_{\varrho, \varrho-1}^c(\mathbf{p})f_{\varrho}(\mathbf{p}, z) + W_{\varrho-1, \varrho}^l(\mathbf{p})f_{\varrho-1}(\mathbf{p}, z) - W_{\varrho, \varrho+1}^l(\mathbf{p})f_{\varrho}(\mathbf{p}, z), \quad (1)$$

в котором отнесенные к единице глубины вероятности потери и захвата электрона обозначены как $W_{\varrho-1, \varrho}^l(\mathbf{p})$ и $W_{\varrho+1, \varrho}^c(\mathbf{p})$ соответственно.

На рис. 2 приведены результаты решения уравнения (1) для парциальных и суммарных угловых распределений ионов Y для глубин проникновения $z_C < z < z_D$. В соответствии с экспериментальными данными [1] при энергии 63 MeV решение уравнения (1) содержит минимум в угловом распределении („нагрев“), а при 177 MeV — максимум („охлаждение“). Однако значения выходов при нулевом угле вылета отличаются от экспериментально измеренных. Несоответствие обусловлено тем, что при оценках вероятностей захвата и потери $W_{\varrho-1, \varrho}^l(\mathbf{p})$ и $W_{\varrho+1, \varrho}^c(\mathbf{p})$ (см. [2]) не учитывалось отличие траекторий каналированных ионов от прямолинейных. Это отличие изменяет соотношение между вероятностями потери и захвата электрона. Для оценки этого фактора введем в уравнение (1) поправочные коэффициенты η_c и η_l следующим образом:

$$\frac{\partial f_{\varrho}(\mathbf{p}, z)}{\partial z} = \eta_c [W_{\varrho+1, \varrho}^c(\mathbf{p})f_{\varrho+1}(\mathbf{p}, z) - W_{\varrho, \varrho-1}^c(\mathbf{p})f_{\varrho}(\mathbf{p}, z)] + \eta_l [W_{\varrho-1, \varrho}^l(\mathbf{p})f_{\varrho-1}(\mathbf{p}, z) - W_{\varrho, \varrho+1}^l(\mathbf{p})f_{\varrho}(\mathbf{p}, z)]. \quad (2)$$

Численный анализ уравнения (2) показывает, что если значение параметра η_l меньше единицы ($\eta_l = 0.5$, $\eta_c = 2$), то выход в нуле при энергии 63 MeV уменьшается и становится равным ~ 0.7 , что достаточно близко к экспериментальному значению. При энергии же 177 MeV и значении параметра η_l больше единицы ($\eta_l = 3.5$, $\eta_c = 1$) рассчитанное значение выхода в нуле увеличивается и оказывается

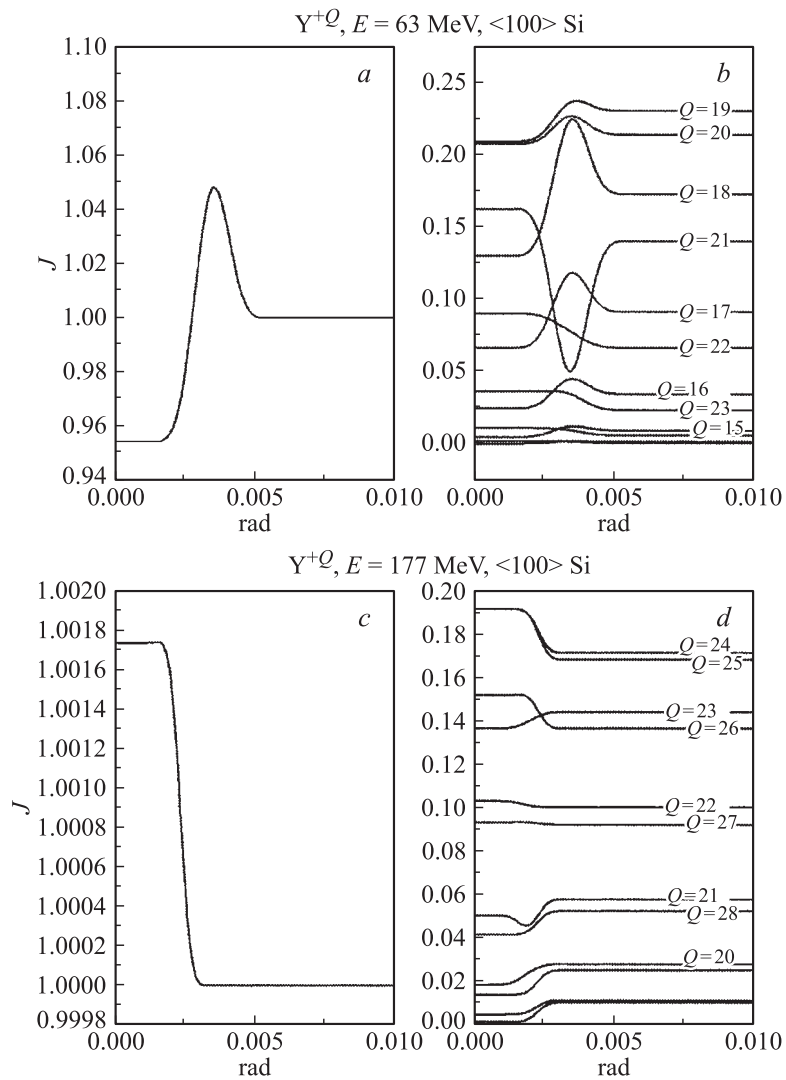


Рис. 2. Рассчитанные суммарные (c) и парциальные (d) угловые распределения изотропного пучка ионов Y с энергией 63 и 177 MeV, прошедшего тонкий кристалл кремния вдоль оси $\langle 100 \rangle$.

равным ~ 1.4 , что также достаточно близко к экспериментальному значению. Таким образом, согласие с экспериментальными данными достигается при предположении, что при энергии 177 MeV вероятность захвата электрона каналированным ионом Y подавлена по отношению к вероятности потери, а при энергии 63 MeV, наоборот, вероятность потери электрона подавлена по отношению к вероятности захвата. Такой результат можно качественно понять с точки зрения критерия Бора, а именно вероятность подхвата на данную орбиту пренебрежимо мала, если скорость электрона на этой орбите относительно мишени больше скорости электронов в мишени. Отличие в угловых распределениях ионов при разных энергиях связано с тем, что ионы с меньшей энергией имеют меньшую скорость и в соответствии с критерием Бора могут захватить электроны кристалла с более высоких орбит, которые находятся в доступной для каналирования области. Ионы же с большей энергией имеют большую скорость и могли бы захватить электроны только с более глубоких орбит, но они находятся вне доступной области для каналированных ионов и вероятность их захвата оказывается подавленной. Заметим, что поскольку эффективность захвата электронов кристалла при малых поперечных импульсах оказывается большей для ионов с меньшей энергией, то это приводит, в частности, к экспериментально установленному в [1] уменьшению среднего заряда в канале при более низких энергиях (в режиме „нагрева“) ионов и к увеличению при более высоких (в режиме „охлаждения“). Аналогичный результат был получен и путем математического моделирования процесса перезарядки в режиме каналирования [4].

Хотя теория ион-атомных столкновений интенсивно развивается в настоящее время, тем не менее она еще не дает готовых ответов для получения надежных данных относительно вероятностей перезарядки ионов в кристаллах. Однако соотношение между вероятностями $W_{Q-1,Q}^l(\mathbf{p})$ и $W_{Q+1,Q}^c(\mathbf{p})$ можно установить, если будут известны парциальные угловые распределения. Действительно, проведя суммирование системы уравнений (1) по Q , нетрудно получить, что при достижении стационарного режима „балансового“ члена, т.е. на глубинах $z_C < z < z_D$ из (1) следует соотношение

$$\frac{f_{Q+1}(\mathbf{p}, z_C)}{f_Q(\mathbf{p}, z_C)} = \frac{W_{Q,Q+1}^l(\mathbf{p})}{W_{Q+1,Q}^c(\mathbf{p})}. \quad (3)$$

Таким образом, по измеренным парциальным угловым распределениям $f_Q(\mathbf{p}, z_C)$ из соотношения (3) можно найти зависимость вероят-

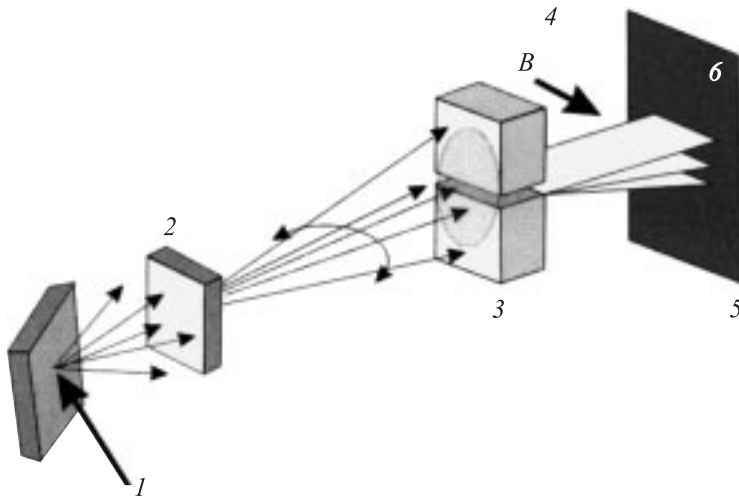


Рис. 3. Возможная принципиальная схема экспериментальной установки для измерения парциальных угловых распределений: 1 — пучок ионов, 2 — кристалл, 3 — щелевой коллиматор, 4 — магнитное поле, 5 — координатный детектор или пленка, 6 — след.

ности захвата электронов от поперечного импульса (или прицельного параметра) при взаимодействии ионов с атомными цепочками. А именно, если известна зависимость вероятности потери электрона от поперечного импульса, то, учитывая определение $W_{Q,Q+1}^l(\mathbf{p})$ и $W_{Q+1,Q}^c(\mathbf{p})$ как средние значения по доступной области, из (3) можно получить зависимость вероятности захвата от прицельного параметра

$$W_{Q+1,Q}^c(r) = -\frac{1}{2\pi} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[S(p_r) W_{Q,Q+1}^l(p_r) \frac{f_Q(p_r, z)}{f_{Q+1}(p_r, z)} \right], \quad (4)$$

где $S(p)$ — зависящая от поперечного импульса площадь доступной области, $p_r = \sqrt{2M_1 U_{Q+1}(r)}$, $U_Q(r)$ — потенциал взаимодействия иона с атомными цепочками.

На рис. 3 приведена возможная принципиальная схема экспериментальной установки со щелевым коллиматором, с помощью которой можно было бы измерить парциальные угловые распределения изотропных пучков, прошедших через ориентированные кристаллы.

Изотропный пучок ионов, получаемый при рассеянии на неподвижной мишени, после рассеяния в ориентированном кристалле и прохождения щелевого коллиматора разделяется магнитным полем по зарядовым состояниям и регистрируется координатным детектором. По затенению полос в треках, соответствующих различным зарядовым состояниям, можно судить о парциальных угловых распределениях ионов.

Работа выполнена при поддержке РФФИ, грант № 06-08-00245-а.

Список литературы

- [1] Gruner F., Assmann W., Bell F., Schubert M., Andersen J.U., Karamian S., Bergmaier A., Dollinger G., Gorgens L., Gunther W., Toulemonde M. // Phys. Rev. 2003. V. B 68. P. 174104.
- [2] Malyshevsky V.S. // Phys. Rev. 2005. V. B 72. P. 094109.
- [3] Shima K., Kuno N., Yamanouchi M. // Phys. Rev. 1987. V. A 40. P. 3557.
- [4] Гранкина Т.В., Похил Г.П., Чердынцев В.В. // Поверхность. 2005. Т. 4. С. 20.