

УДК 539.1.01

© 1992

ДЕКАНАЛИРОВАНИЕ ИОНОВ В УСЛОВИЯХ НЕЛИНЕЙНОГО РЕЗОНАНСА

A. B. Кононенко

С помощью резонансной теории возмущений движение ионов в плоскостных каналах исследуется вблизи резонанса, вызванного периодическим воздействием со стороны пересекаемых атомных плоскостей. Анализируются общие закономерности такого движения, вытекающие из нелинейного характера колебаний ионов в канале. По полученному фазовому портрету установлены параметры резонанса, определяющие величину доли деканализировавших ионов η и интервала углов поворота мишени α , в котором наблюдается резонансное деканалирование. На основе потенциала Мольер выполнена расчет зависимостей $\eta(\alpha)$ для пучка протонов с энергией 0.56 МэВ и кремниевой мишени.

При прохождении пучков заряженных частиц через кристаллические мишени наиболее точная информация о состоянии частиц и взаимодействии их с атомами мишени часто может быть получена с помощью различных резонансных явлений. Ряд таких явлений связан с возмущающим воздействием атомных плоскостей, пересекаемых канализированными ионами. Если частота этого воздействия сравнима с частотой поперечных колебаний иона, возможен резонанс, приводящий к увеличению амплитуды колебаний и деканалированию.

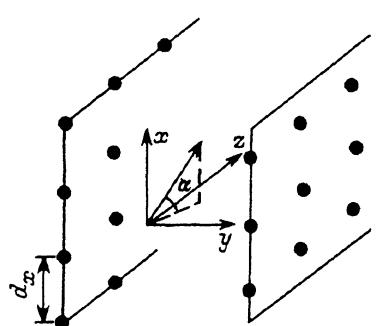
Детальные экспериментальные исследования резонансного деканалирования проводились с помощью пучков протонов и ионов Не с энергиями порядка одного или нескольких МэВ, канализированных в плоскостных каналах монокристаллов кремния [1-5]. Для таких пучков резонанс возникает при пересечении каких-либо атомных плоскостей под малыми углами и оказывается вблизи области перехода от осевого канализирования к плоскостному. Результаты экспериментов, будучи качественно близкими во всех этих случаях, свидетельствуют, что наиболее четкий резонанс наблюдается для плоскостного канала (110), в то время как для других каналов он может полностью отсутствовать.

Основы теории резонансного деканалирования разработаны в работе [6], где получены уравнения движения иона, учитывающие изменение потенциала вдоль канала, и найден точный вид условий резонанса. На этой основе в [7] получены выражения для минимальной резонансной амплитуды колебаний иона и интервала углов падения пучка, в котором наблюдается резонанс. Однако полученные в [6] уравнения не поддаются аналитическому решению, поэтому не удается найти траектории движения ионов, определить долю деканализировавших частиц и установить причину ее существенного различия для разных типов каналов. Кроме того, в работах [6, 7] при анализе поперечных колебаний ионов не учитывается наличие в системе отрицательной обратной связи. Из-за нелинейного характера колебаний увеличение амплитуды приводит к изменению частоты и нарушению условия резонанса. Согласно теории нелинейных колебаний [8], это может качественно изменить характер колебаний системы. В частности, как будет показано ниже, в этом случае из выполнения условий резонанса еще не следует, что амплитуда колебаний иона будет возрастать.

Рис. 1. Геометрия движения иона в канале.

α — угол между направлением скорости иона и плоскостью (y, z) .
Представлен случай «В», когда стены канала сдвинуты на $d_x/2$.

В настоящей работе движение ионов исследуется с помощью резонансной теории возмущений. Этот метод благодаря переходу к переменным действие — угол позволяет найти траектории ионов в фазовом пространстве вблизи нелинейного резонанса и определить зависимость амплитуды колебаний ионов от времени. Это дает возможность установить, при каких начальных условиях ион деканализирует, и рассчитать долю резонансно деканализировавших частиц.



1. Фазовый портрет движения ионов в плоскостном канале

Поперечное движение иона в плоскостном канале кристаллической мишени (рис. 1) описывается гамильтонианом

$$H = H_0 + \sum_{g \neq 0} V_g(y) \cos(g\tau), \quad H_0 = \frac{m\dot{y}^2}{2} + V_0(y). \quad (1)$$

Здесь вектор r с компонентами x и z описывает продольное движение иона; g — векторы решетки, обратной к плоской решетке стенки канала. Гамильтониан H_0 в (1) соответствует приближению непрерывного потенциала, а последнее слагаемое, описывающее взаимосвязь продольного и поперечного движений, считается возмущением. Удобство переменных действие — угол состоит в том, что H_0 не зависит от угловой переменной θ [8], которая связана с частотой поперечных колебаний иона в канале ω соотношением

$$\theta = \omega(a)t + \theta_0. \quad (2)$$

Это позволяет разложить возмущение в ряд Фурье по θ и выделить резонансное слагаемое. Частота колебаний ω зависит от амплитуды a из-за ангармонического характера $V_0(y)$.

Согласно [6], следует различать два практических важных случая: А) отсутствие относительного сдвига стенок плоскостного канала в плоскости (x, z) , В) сдвиг составляет половину периода $d_x/2$ (рис. 1). Потенциал $V_0(y)$ одинаков для этих случаев, а $V_g(y)$ являются четными и нечетными функциями y в случаях А и В соответственно [6]. Учитывая, что в разложение Фурье четной функции y входят только четные гармоники θ , а в разложение нечетной — нечетные, находим гамильтониан H в переменных действие — угол

$$H(J, \theta) = H_0(J) + \sum_{g \neq 0} \sum_{n=0}^{\infty} 2\gamma_{gn}(J) f(k_n \theta) \cos(\Omega_g t + \delta), \quad (3)$$

где

$$f(k_n \theta) = \begin{cases} \cos(k_n \theta), & k_n = 2n \\ \sin(k_n \theta), & k_n = 2n - 1 \end{cases} \quad (\text{A}),$$

$\Omega_g = v_{\parallel} g / v_{\perp}$ — скорость продольного движения иона, а $\delta = \tau(0) g$. Поскольку z -координата иона на входе в канал $z(0) = 0$, начальная фаза δ определяется только значением $x(0)$, т. е. положением точки входа относительно атомных плоскостей, перпендикулярных стенкам канала. Для быстрых ионов $v_{\parallel} \gg v_{\perp}$, поэтому ω и Ω_g сравнимы по величине, только если ион движется под малым углом к кристаллографической оси. Пренебрегая в сумме (3) всеми слагаемыми, кроме резонансного, после простого преобразования получаем

$$H(I, \theta) = H_0(I) + \gamma_n(I) f(k_n \theta - \Omega t - \delta). \quad (4)$$

Здесь и далее индекс «g» у γ_n и Ω опускается, функция f имеет тот же смысл, что и в (3). Из (4) с учетом (2) находим условия резонанса

$$k_n \omega(a) = \Omega, \quad (5)$$

тождественные полученным в [6].

Действуя обычным для резонансной теории возмущений образом [8], разлагаем H_0 по отклонению $\Delta I = I - I_0$ действия от резонансного значения I_0 с точностью до членов второго порядка. При этом (4) приобретает вид

$$H = (1/2) k_n G (\Delta I)^2 - k_n |\gamma_n| \cos \psi, \quad (6)$$

из которого следует уравнение движения

$$\dot{\psi} + k_n^2 G |\gamma_n| \sin \psi = 0. \quad (7)$$

Здесь $G = (d\omega/dI)_{I=I_0}$, $\psi = k_n \theta - \Omega t - \delta + \psi_0$, причем при $\gamma_n < 0$ значение ψ_0 равно 0 и $-\pi/2$ в случаях А и В соответственно. Если $\gamma_n > 0$, то в обоих случаях ψ_0 надо увеличить на π . Новые переменные ΔI и ψ являются «медленными» и описывают уже не сами поперечные колебания ионов в канале, а лишь характер их изменения со временем под действием возмущения. Поскольку при выводе (6) предполагалось выполнение неравенства $\Delta I \ll I_0$, то, учитывая, что амплитуда a — монотонная функция действия I , для отклонения Δa амплитуды от резонансного значения a_0 можно записать

$$\Delta a = \Delta I (da/dI)_{I=I_0}. \quad (8)$$

Таким образом, зависимость $\Delta I(t)$ характеризует изменение амплитуды со временем, тогда как зависимость $\psi(t) = k_n \omega(t) - \Omega$ описывает временное изменение частоты колебаний иона. Выражения (6) и (7) тождественны гамильтониану и уравнению движения нелинейного маятника соответственно. Это позволяет стандартным образом (см., например, [8]) представить траектории иона вблизи резонанса в фазовом пространстве $I - \psi$ (или $a - \psi$; рис. 2) и записать зависимость ψ и ΔI от времени. Так, для ΔI находим

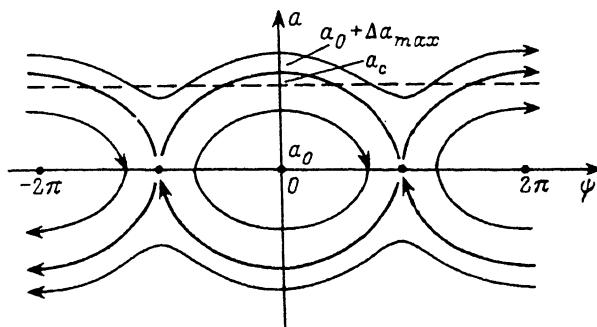


Рис. 2. Фазовый портрет поперечного движения ионов в канале вблизи нелинейного резонанса. a_0 и a_c — резонансное и критическое значения амплитуды колебаний иона соответственно. Ширина резонанса по амплитуде Δa_{\max} — максимальное расстояние между сепаратрисой и осью $a = a_0$.

$$\Delta I(t) = \left(2\kappa\omega_{MO}/k_n G\right) \begin{cases} \text{cn} [\omega_{MO}t + \varphi; \chi], & \chi \leq 1, \\ \text{dn} [\chi(\omega_{MO}t + \varphi); \chi], & \chi \geq 1, \end{cases} \quad (9)$$

где

$$\omega_{MO} = k_n (G|\gamma_n|)^{1/2}, \quad (10)$$

$$\chi^2 = (1 + \Delta E/k_n |\gamma_n|)/2, \quad (11)$$

cn и dn — эллиптические функции; φ определяется начальными значениями ΔI и ψ ; ΔE — энергия, соответствующая гамильтониану (6). Значение ΔE , увеличенное на $k_n |\gamma_n|$, — это порция энергии, которой ион обменивается с мишенью в процессе движения, что и приводит к изменению амплитуды его колебаний; $\Delta E = -k_n |\gamma_n|$ (или $\chi = 0$) отвечает устойчивому положению равновесия, а при $\Delta E = k_n |\gamma_n|$ (или $\chi^2 = 1$) траектории движения иона на рис. 2 соответствуют неустойчивое положение равновесия или одна из сепаратрис. Положениям равновесия на фазовой плоскости отвечают колебания ионов с постоянной амплитудой. Такие колебания являются исключением и могут реализоваться только у ионов, попавших в канал в точке, принадлежащей одной из атомных плоскостей, перпендикулярных стенкам канала. В общем случае, когда χ^2 отлично от нуля и единицы, условие $\chi^2 < 1$ соответствует финитному изменению ψ , при котором амплитуда a и частота ω периодически изменяются вокруг резонансных значений. При $\chi^2 > 1$ изменение ψ инфинитно, а значения a и ω , периодически изменяясь, остаются, однако, либо больше, либо меньше резонансных значений. Таким образом, в условиях нелинейного резонанса колебания ионов в канале оказываются модулированными с частотой модуляции ω_M , которая при ΔE , близких к $-k_n |\gamma_n|$, определяется соотношением (10). Диапазон изменения амплитуды (свой для каждого иона) зависит от величины ΔE , которая в свою очередь определяется значениями ΔI и ψ при $t = 0$, т. е. на входе в канал. Максимально возможное изменение амплитуды совпадает по величине с удвоенной шириной резонанса Δa_{\max} (рис. 2), которая, согласно (8), определяется конкретным видом зависимости ΔI и шириной резонанса по действию ΔI_{\max} . Для последней из (6) находим

$$\Delta I_{\max} = (2|\gamma_n|/G)^{1/2}. \quad (12)$$

Таким образом, диапазон изменения амплитуды у всех ионов оказывается конечным. Последнее качественным образом отличает настоящую ситуацию от линейного случая и существенно влияет на деканализование ионов.

2. Доля деканализировавших ионов

Будем считать, что ион деканализирует, если он приближается к стенке канала на расстояние, меньшее радиуса экранирования Томаса—Ферми a_{TF} . Рассмотрим случай, когда пучок ионов падает в направлении, параллельном плоскости стенок канала, т. е. в плоскости (x, z) на рис. 1, а сами ионы распределены равномерно в плоскости (x, y) . Для такого пучка, согласно (2), $\theta_0 = \theta(0) = \pm\pi/2$ для ионов, попавших в правую и левую половины канала соответственно. Тогда для резонанса порядка n при $t = 0$

$$\psi(0) = \begin{cases} \pm n\pi - \delta & \text{(A)} \\ (\pi/2)[\pm(2n-1)-1]-\delta & \text{(B)} \end{cases} \quad (13a)$$

для $\gamma_0 < 0$ и

$$\psi(0) = \begin{cases} \pm n\pi + \pi - \delta & \text{(A)} \\ (\pi/2)[\pm(2n-1)+1]-\delta & \text{(B)} \end{cases} \quad (13b)$$

для $\gamma_0 > 0$. В (13) знак + соответствует ионам с $x(0) > 0$, а знак — ионам с $x(0) < 0$. Естественно, что при этом в случае А ионы, попавшие в разные половины канала, оказываются в одинаковых условиях (их значения $\phi(0)$ отличаются на четное число π), а в случае В эти условия оказываются различными ($\psi(0)$ различаются на нечетное число π). Важным следствием (13) является то, что всем ионам, имеющим на входе в канал одинаковые значения $x(0)$, соответствуют одинаковые значения $\psi(0)$, т. е. в начальный момент времени таким ионам на фазовой плоскости отвечают прямые, параллельные осям ординат. Исходя из фазового портрета (рис. 2), для каждой из таких прямых нетрудно рассчитать долю ионов, траектории которых пересекают прямую $a = a_c$, т. е. долю ионов, которые впоследствии деканализируют. Очевидно, что последняя будет существенным образом зависеть от взаимного расположения критического a_c и резонансного a_0 значений амплитуды (рис. 2).

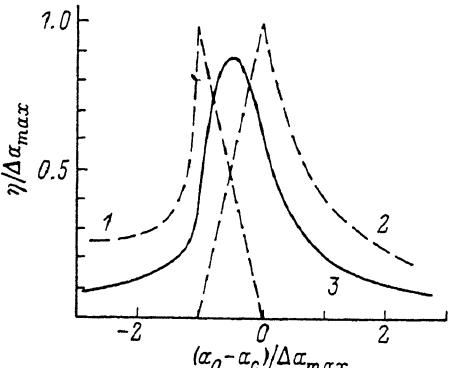
Кривые 1, 2 на рис. 3 представляют собой примеры такой зависимости для $\psi(0) = \pm(2m+1)\pi$ и $\psi(0) = \pm 2m\pi$ соответственно. Чтобы получить полную долю резонансно деканализировавших ионов η для всего пучка, полученные для каждого $\phi(0)$ результаты необходимо усреднить по всем возможным значениям $\psi(0)$. Результат такого усреднения, одинаковый для случаев А и В, представляет кривую 3 на рис. 3. Аналитический вид зависимости $\eta(a_0 - a_c)$ определяется выражениями

$$\eta = \Delta a_{\max} \begin{cases} [1 - 2E(\lambda)/\pi]/\lambda, & \lambda = \Delta a_{\max}/(a_c - a_0), \quad a_0 < a_c - \Delta a_{\max}, \\ (2/\pi + \lambda) + 4[(1 - \lambda^2)K(\lambda) - E(\lambda)]/\pi, & \lambda = (a_c - a_0)/\Delta a_{\max}, \\ & a_c - \Delta a_{\max} < a_0 < a_c, \\ [2E/\pi - (1 - \lambda^2)^{1/2}]/\lambda, & \lambda = \Delta a_{\max}/[(a_0 - a_c)^2 + (\Delta a_{\max})^2]^{1/2}, \\ & a_c < a_0, \end{cases} \quad (14)$$

где $K(\lambda)$ и $E(\lambda)$ — эллиптические интегралы первого и второго рода соответственно; амплитуда a измеряется в единицах полуширины канала l ; $a_c = 1 - a_{TF}/l$ — критическое значение амплитуды. Из соотношений (14) и кривой 3 на рис. 3 следует, что ширина резонанса по амплитуде Δa_{\max} является основной количественной характеристикой, определяющей как долю деканализирующих частиц, так и ширину резонансного максимума на кривой $\eta(a_0)$. Поэтому резонансное деканализирование будет наблюдаться только в тех каналах, где

Рис. 3. Зависимость доли резонансно деканализировавших ионов от разности между резонансным и критическим значениями амплитуды колебаний иона в плоскостном канале.

Кривые 1 и 2 отвечают $\psi(0)$, равным $(2m+1)\pi$ и $2\pi m$ соответственно; кривая 3 — пучку в целом. Δa_{\max} измеряется в единицах полуширины канала.



движению иона на фазовой плоскости a — ψ соответствует резонанс достаточной ширины. Максимум кривой 3 на рис. 3 достигается, когда резонансное значение амплитуды меньше критического на величину, равную $\Delta a_{\max}/2$. Следовательно, наблюдаемые экспериментально резонансные минимумы прозрачности соответствуют таким углам падения пучка α , при которых условия резонанса (5) реализуются для частиц, влетевших в канал на расстоянии $a_{TF} + \Delta a_{\max}/2$ от каждой из его стенок. Сделанные выводы являются общими в случае нелинейного резонанса и дают возможность экспериментально оценить ширину резонанса по амплитуде, что позволяет получить информацию о внутриканальном потенциале. Важность приведенных на рис. 3 зависимостей связана также с тем, что резонансная амплитуда a_0 является монотонной функцией угла падения пучка α , определяемой выражением

$$\omega(a_0) = \alpha \Omega / k_z. \quad (15)$$

Следовательно, представленные на рис. 3 графики определяют основные черты соответствующих зависимостей доли деканализировавших ионов от угла падения пучка α , измеряемых в экспериментах по резонансному деканализированию.

3. Потенциал Мольер

Точный расчет зависимости η от α возможен только в рамках конкретного межатомного взаимодействия. Воспользуемся для этой цели потенциалом Мольер, ограничиваясь первым слагаемым вида

$$v(R) = (A/R) \exp(-bR). \quad (16)$$

Здесь $A = 0.35 Z_1 Z_2 e^2$, $b = 0.3/a_{TF}$. В этом случае

$$V_0(y) = V_0 \operatorname{ch}(by), \quad (17)$$

$$V_g^A(y) = 2p_g V_0 \operatorname{ch}(b_g y), \quad (18a)$$

$$V_g^B(y) = -2p_g V_0 \operatorname{sh}(b_g y), \quad (18b)$$

где индексы A и B отвечают каналам соответствующих типов, $V_0 = (4\pi A/b s) \exp(-bl)$, $p_g = (b/b_g) \exp(b - b_g)$, $b_g = (b^2 + g^2)^{1/2}$, l — полуширина канала, а s — площадь, приходящаяся на один атом в стенке канала. Потенциал (17) несколько отличается от реального потенциала, действующего на ион в канале. Это отличие минимально в центре канала и нарастает с приближением к его стенкам, поэтому использование потенциала Мольер в виде (16) приводит к некоторому сужению резонансного интервала углов α по сравнению с наблюдаемым экспериментально.

В то же время для потенциала (17) можно найти аналитическую зависимость между действием I и амплитудой колебаний иона a в виде

$$I = \frac{8V_0}{\pi\omega_0} \frac{K(u) - E(u)}{(1 - u^2)^{1/2}}, \quad (19)$$

где $u = \operatorname{th}(ba/2)$, $\omega_0^2 = V_0 b^2/m$, m — масса ионов в пучке. Определив с помощью (12) ΔI_{\max} , используя (8) и (19), нетрудно найти ширину резонанса Δa_{\max} . Воспользовавшись (15) и учитывая, что для потенциала (17) частота связана с амплитудой соотношением

$$\omega(u) = \frac{dH_0}{dI} = \frac{\pi\omega_0}{2K(u)(1 - u^2)^{1/2}}, \quad (20)$$

можно рассчитать зависимость доли резонансно деканализировавших частиц η от угла падения пучка α для реальной экспериментальной ситуации.

4. Результаты расчетов и обсуждение

Для сравнения развитой в настоящей работе теории с экспериментальными данными выражения (14) использовались для расчета доли деканализировавших протонов с энергией 0.56 МэВ, распространяющихся по плоскостным каналам кремниевой мишени. При этом значения резонансной амплитуды a_0 , ширины резонанса по амплитуде Δa_{\max} и их зависимости от угла падения пучка α рассчитывались на основе потенциала (16). Наряду с резонансно деканализировавшими ионами учитывался вклад частиц, сразу оказавшихся на расстоянии, меньшем a_{TF} , от стенок канала и потому деканализировавших. Результаты расчетов представлены на рис. 4. Поскольку половина (100)-каналов относится к типу А, а половина — к типу В (далее они именуются как (100) А и (100) В), этим каналам соответствуют два резонансных максимума одного порядка, обозначенных 2A и 2B. Так как резонансы первого порядка попадают в область осевого канализования и не наблюдаются при плоскостном канализировании [2], на рис. 4 представлены зависимости $\eta(\alpha)$ для резонансов второго порядка.

Экспериментальное исследование прозрачности монокристаллов кремния при облучении их пучками протонов^[4, 5] обнаруживает четкий минимум, отвечающий резонансу второго порядка, только для канала (110). Для каналов (100) и (111) подобные минимумы отсутствуют. Рис. 4 показывает, что результаты наших расчетов согласуются с этими данными. Действительно, резонансный пик на кривой 4 (рис. 4), соответствующий каналу (110), примерно на порядок превосходит по величине

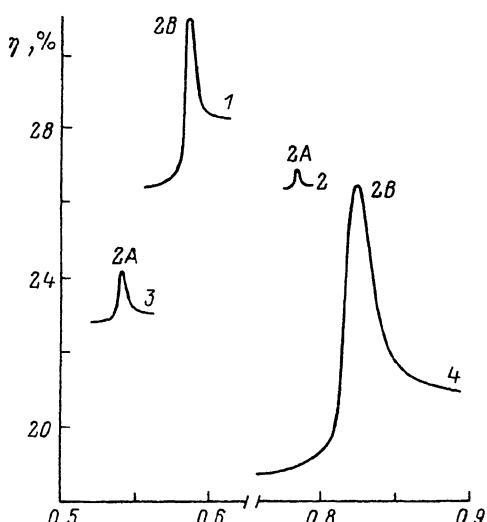


Рис. 4. Зависимость доли деканализировавших протонов с начальной энергией 0.56 МэВ от угла падения пучка α для различных каналов кремниевой мишени.

Кривые 1, 2, 3 и 4 отвечают резонансу второго порядка в каналах (100)В, (100)А, (111) и (110) соответственно.

ники, соответствующие каналам (111) и (100) А, и примерно вдвое превосходит пик, соответствующий каналу (100) В. В наших расчетах это следует из того, что для каналов типа В коэффициенты γ_α по абсолютной величине значительно больше аналогичных коэффициентов для каналов типа А. Поэтому для каналов со сдвинутыми стенками ширина резонанса по амплитуде Δa_{\max} существенно больше, чем в отсутствие сдвига. Так, при $\eta = \eta_{\max}$ для каналов (110) и (100) В Δa_{\max} принимает значения, равные 0.09 и 0.10 соответственно, тогда как для каналов (111) и (100) А Δa_{\max} равняется соответственно 0.021 и 0.010 (в единицах D). Поскольку, согласно результатам нашего анализа, величина Δa_{\max} определяет как максимальную долю деканализировавших ионов η_{\max} , так и ширину резонансного пика на кривой $\eta(\alpha)$, эти величины для канала (110) значительно больше, чем для каналов (111) и (100) А. В случае канала (100) В меньшее по сравнению с каналом (110) значение η_{\max} объясняется тем, что из всех ионов, попавших в каналы типа (100), только половина оказывается в каналах (100) В, что вдвое уменьшает η_{\max} для этого случая. Выше упоминалось, что экспериментально резонансное деканализование наблюдалось при углах падения пучка α , близких к области ось-плоскостного перехода. Однако, как следует из наших расчетов и данных эксперимента [4], для канала (100) В резонанс второго порядка попадает внутрь этой области. Действительно, максимальное значение η на кривой I , отвечающей каналу (100) В, реализуется при $\alpha = 0.59^\circ$, тогда как минимум прозрачности, связанный с ось-плоскостным переходом, для этого канала наблюдается при $\alpha = 0.83^\circ$. Следовательно, если для канала (111) отсутствие резонансного минимума на кривой прозрачности объясняется малым количеством резонансно деканализирующих протонов, то для канала (100) это является следствием малости η_{\max} для каналов (100) А и отсутствия резонанса второго порядка для каналов (100) В в области углов α , отвечающей плоскостному канализированию.

Таким образом, проведенный в настоящей работе анализ дает возможность понять как качественные, так и количественные особенности деканализирования ионов в условиях нелинейного резонанса и рассчитать зависимость доли деканализировавших ионов от угла падения пучка α . Результаты такого расчета для пучков быстрых протонов и кремниевой мишени позволяют выяснить причину существенного различия экспериментальных результатов, наблюдавшегося в этом случае для различных типов каналов.

Список литературы

- [1] Булгаков Ю. В., Шульга В. И. // ФТТ. 1975. Т. 17. № 1. С. 353—355.
- [2] Bulgakov Yu. V., Shulga V. I. // Radiation Effects. 1976. V. 28. P. 15—21.
- [3] Bulgakov Yu. V., Eltekova D. V., Filatov V. N., Koshevoy I. D., Shulga V. I. // Physics Letters. 1976. V. 56A. N 5. P. 407—408.
- [4] Bulgakov Yu. V., Eltekova D. V., Filatov V. N., Koshevoy I. D., Lenkeit K., Shulga V. I. // Physics Letters. 1978. V. 68A. N 3, 4. P. 355—356.
- [5] Булгаков Ю. В., Кошевои И. Д., Ленкайт К. и др. // Тр. IX Всес. совещ. по физике взаимодействия заряженных частиц с монокристаллами. М., 1979. С. 110—116.
- [6] Kishmakhov M. A., Wedell R. // Phys. Stat. Sol. (b). 1976. V. 76. P. 119—131.
- [7] Lenkeit K., Wedell R. // Phys. Stat. Sol. (b). 1980. V. 98. P. 235—244.
- [8] Заславский Г. М., Сардеев Р. З. Введение в нелинейную физику. М.: Наука, 1988. 386 с.