

01;05;10

Пространственное и угловое распределение заряда тяжелых ионов при каналировании в кристаллах

© В.С. Малышевский, С.В. Рахимов

Ростовский государственный университет,
344090 Ростов-на-Дону, Россия
e-mail: gvidon@aanet.ru

(Поступило в Редакцию 15 мая 2006 г.)

Разработана кинетическая теория прохождения многозарядных тяжелых ионов через кристаллы. Теория учитывает как диффузию в пространстве поперечных импульсов, так и обмен зарядом между кристаллом и ионом. Это позволяет дать адекватное описание наблюдаемых угловых распределений тяжелых ионов, проходящих через ориентированные кристаллы, вычислить парциальные угловые распределения различных зарядовых состояний и дать физическое объяснение обнаруженным эффектам „охлаждения“ и „нагрева“ ионных пучков при каналировании в кристаллах. Проведены расчеты углового и пространственного распределения заряда каналированных ионов с различной энергией. Проявление эффектов „охлаждения“ или „нагрева“ пучков тяжелых многозарядных ионов определяется зависимостью вероятностей захвата и потери электронов от прицельного параметра при взаимодействии ионов с атомными цепочками, что и определяет характер углового и пространственного распределения заряда каналированных ионов.

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

Введение

При проникновении иона в твердое тело зарядовое состояние его быстро изменяется благодаря обмену электронами между ионом и твердым телом. Интерес к этому явлению был впервые проявлен в работе [1] и не ослабевает до сих пор. Исследованию равновесных зарядовых состояний ускоренных ионов при их прохождении через аморфные твердые тела посвящено достаточно много работ [2–4], где достигнут значительный прогресс в понимании наблюдаемых закономерностей.

При движении ионов через кристаллические среды возникают новые явления, которые до настоящего времени не исследованы в полной мере. В недавних работах [5–10] было обнаружено, что прохождение тяжелых ионов через ориентированные кристаллы сопровождается проявлением ряда эффектов, нарушающих изотропность углового распределения первоначально изотропного пучка. Систематическое экспериментальное исследование ориентационной зависимости прохождения различных ионов через различные кристаллы [10] 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. Это свидетельствует о нарушении принципа детального равновесия, основополагающего в физике ориентационных явлений [11], и говорит о том, что кинетика прохождения многозарядных ионов через кристаллы является существенно неравновесной. Внимание на это обстоятельство было впервые обращено в работе [5], где была высказана гипотеза о значительном влиянии эффектов перезарядки ионов на динамику и

кинетику их прохождения через ориентированные кристаллы.

Теоретическое изучение влияния перезарядки на каналирование тяжелых ионов сопряжено с рядом трудностей, связанных прежде всего с необходимостью вычисления вероятностей соответствующих процессов при взаимодействии ионов с атомными цепочками и плоскостями [12]. Существенный прогресс в этом может быть достигнут с помощью математического моделирования [13,14]. Однако несмотря на эффективность такого подхода, он не обладает достаточной наглядностью по сравнению с описанием на основе кинетической теории каналирования [15,16].

При использовании кинетической теории для описания эффектов перезарядки каналированных ионов требуется введение новой дискретной переменной, определяющей зарядовое состояние иона. Кинетика прохождения ионов через ориентированный кристалл будет при этом описываться системой кинетических уравнений, число которых равно зарядовому числу иона Z_1 . Реализация такого подхода в [17] позволила проследить эволюцию зарядовых состояний ионов при их движении вдоль кристаллографических направлений, которая существенно отличается от случая движения в аморфной среде, и рассчитать угловые распределения каналированных ионов, прошедших кристалл. Изменение распределения по зарядовым состояниям в свою очередь влияет на перераспределение плотности потока ионов в каналах кристалла и, в конечном счете, на характер их взаимодействия с кристаллом. Для более детального выяснения причины возникающих закономерностей в данной работе проведены расчеты углового и пространственного распределения заряда каналированных ионов. Это позволило дать физическую интерпретацию наблюдаемым эффектам.

Основные уравнения

Обычно основное кинетическое уравнение для каналирования записывается в терминах поперечных энергий [15,16]. Здесь мы используем представление кинетического уравнения в терминах поперечных импульсов.

Состояние частицы в канале с заданной поперечной энергией определяется траекторией в 4-мерном пространстве поперечных импульсов и координаты $\{\mathbf{p}, \mathbf{r}\}$. Фазовые траектории при осевом каналировании не замкнуты, поскольку потенциал в осевом канале не гармоничен. Поэтому фазовая траектория заполняет плотно некоторый объем в пространстве $\{\mathbf{p}, \mathbf{r}\}$, величина которого определяется значением поперечной энергии (суммой потенциальной и кинетической энергии). Проекция этого объема на пространственные оси $\{\mathbf{r}\}$ определяет так называемую доступную область [16].

Для положительно заряженных частиц (в отличие от отрицательно заряженных) непрерывный потенциал в канале близок к нулю в широком диапазоне поперечных координат. При осевом каналировании положительно заряженные частицы проводят наибольшее время именно в этой части канала, где непрерывный потенциал приблизительно постоянен. Так что мы можем рассматривать зависимость функции распределения только от поперечных импульсов и глубины проникновения частиц в кристалл. Такой подход использовался, в частности, в [11], где потенциал в поперечной плоскости аппроксимировался прямоугольной потенциальной ямой. В этом случае кинетическое уравнение для функции распределения имело вид обычного уравнения диффузии Фика в пространстве поперечных импульсов.

В основу кинетической теории каналирования тяжелых ионов, учитывающей эффекты перезарядки, положены три предположения [17]. Во-первых, при выводе кинетических уравнений мы будем пренебрегать изменением продольной компоненты импульса иона, направленной вдоль кристаллографического направления. Такое приближение справедливо для не слишком толстых мишеней и хорошо себя зарекомендовало в исследованиях структурных особенностей кристаллов методом каналирования [18–20]. Во-вторых, предполагается, что начальное состояние пучка ионов представляет собой некогерентный ансамбль, равномерно заполняющий плоскость, перпендикулярную кристаллографическому направлению. В этом случае все прицельные параметры равновероятны, что позволяет провести усреднение вероятности взаимодействия иона с кристаллом по координатам доступной области в поперечной плоскости. Доступная область при этом определяется кинематическими соотношениями. В-третьих, существует большая разница во времени протекания процессов потери (или захвата) электрона ионом и процессов многократного рассеяния, возбуждения валентных электронов и фононов кристалла. Первые процессы являются

быстрыми, и характерное время их протекания намного меньше вторых [13]. Это обстоятельство позволяет представить вероятность комбинированного процесса, содержащего потерю или захват электрона, в виде произведения вероятностей отдельных процессов, что в значительной степени упростит решение поставленной задачи.

Обозначим отнесенную к единице глубины плотность вероятности перехода с изменением зарядового состояния иона и поперечного импульса $Q \rightarrow Q'$, $\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p} - \mathbf{q}$ через $w_{QQ'}(\mathbf{p}, \mathbf{q})$. Если известна зависящая от координат „ \mathbf{r} “ иона в поперечной плоскости канала плотность вероятности $w_{QQ'}(\mathbf{r}, \mathbf{p}, \mathbf{q})$ перехода $Q \rightarrow Q'$, $\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p}' = \mathbf{p} - \mathbf{q}$, то при сделанных выше предположениях можно записать

$$w_{QQ'}(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = \frac{1}{S_Q(\mathbf{p})} \int_{S_Q(\mathbf{p})} w_{QQ'}(\mathbf{r}, \mathbf{p}, \mathbf{q}) d^2r, \quad (1)$$

где $S_Q(\mathbf{p})$ — площадь доступной области внутри элементарной ячейки в поперечной плоскости, которая для иона с зарядом Q , определяется условием

$$\frac{\mathbf{p}^2}{2M_1} \geq U_Q(\mathbf{r}) - U_Q^{(\min)}, \quad (2)$$

где $U_Q(\mathbf{r})$ — значение потенциала в поперечной плоскости в точке с координатами $\mathbf{r} = (x, y)$, $U_Q^{(\min)}$ — минимальное значение потенциала в элементарной ячейке, M_1 — масса каналированного иона.

Уравнение Смолуховского для функции распределения каналированных ионов $f_Q(\mathbf{p}, z)$ в пространстве поперечных импульсов имеет вид

$$\frac{\partial f_Q(\mathbf{p}, z)}{\partial z} = \sum_{Q'} \int d^2q \left[w_{QQ'}(\mathbf{p} + \mathbf{q}, \mathbf{q}) f_{Q'}(\mathbf{p} + \mathbf{q}, z) - w_{QQ'}(\mathbf{p}, \mathbf{q}) f_Q(\mathbf{p}, z) \right]. \quad (3)$$

Как обычно, будем считать, что функция $w_{QQ'}(\mathbf{p}, \mathbf{q})$ быстро убывает с увеличением \mathbf{q} , так что основную роль в интеграле играют значения \mathbf{q} , малые по сравнению со средним поперечным импульсом частиц. Это обстоятельство позволяет произвести в подынтегральном выражении разложение по \mathbf{q} . В результате кинетическое уравнение примет вид

$$\frac{\partial f_Q(\mathbf{p}, z)}{\partial z} = \sum_{Q'} \left\{ W_{Q'Q}(\mathbf{p}) f_{Q'}(\mathbf{p}, z) - Q_{QQ'}(\mathbf{p}) f_Q(\mathbf{p}, z) + \frac{\partial}{\partial p_\alpha} \left[A_{Q'Q}^\alpha f_{Q'}(\mathbf{p}, z) + D_{Q'Q}^{\alpha\beta} \frac{\partial}{\partial p_\beta} f_{Q'}(\mathbf{p}, z) \right] \right\}, \quad (4)$$

где вероятность перезарядки $W_{Q'Q}(\mathbf{p})$, обобщенные коэффициенты диффузии $D_{Q'Q}^{\alpha\beta}$ и динамического трения $A_{Q'Q}^\alpha$

определены соответственно следующим образом:

$$W_{Q'Q}(\mathbf{p}) = \int w_{Q'Q}(\mathbf{p}, \mathbf{q}) d^2q, \quad (5)$$

$$D_{Q'Q}^{\alpha\beta} = \frac{1}{2} \int q_\alpha q_\beta w_{Q'Q}(\mathbf{p}, \mathbf{q}) d^2q,$$

$$A_{Q'Q}^\alpha = \int q_\alpha w_{Q'Q}(\mathbf{p}, \mathbf{q}) d^2q + \frac{\partial}{\partial p_\beta} D_{Q'Q}^{\alpha\beta}. \quad (6)$$

Плотность вероятности $w_{Q'Q}(\mathbf{p}, \mathbf{q})$ удобно представить в виде суммы двух слагаемых, которые описывают процессы, происходящие без изменения и с изменением зарядового состояния соответственно

$$w_{Q'Q}(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = \delta_{Q'Q} w_Q^{(10)}(\mathbf{p}, \mathbf{q}) + (1 - \delta_{Q'Q}) w_{Q'Q}^{(2)}(\mathbf{p}, \mathbf{q}). \quad (7)$$

Тогда уравнение (4) можно переписать в виде

$$\begin{aligned} \frac{\partial f_Q(\mathbf{p}, z)}{\partial z} &= \frac{\partial}{\partial p_\alpha} \left[A_Q^{(1)\alpha} f_Q(\mathbf{p}, z) + D_Q^{(1)\alpha\beta} \frac{\partial}{\partial p_\beta} f_Q(\mathbf{p}, z) \right] \\ &+ \sum_{Q' \neq Q} \left[W_{Q'Q}^{(2)}(\mathbf{p}) f_{Q'}(\mathbf{p}, z) - W_{QQ'}^{(2)}(\mathbf{p}) f_Q(\mathbf{p}, z) \right] \\ &+ \sum_{Q' \neq Q} \frac{\partial}{\partial p_\alpha} \left[A_{Q'Q}^{(2)\alpha} f_{Q'}(\mathbf{p}, z) + D_{Q'Q}^{(2)\alpha\beta} \frac{\partial}{\partial p_\beta} f_{Q'}(\mathbf{p}, z) \right]. \quad (8) \end{aligned}$$

Кинетические коэффициенты в уравнении (8) определены через величины $w_Q^{(1)}(\mathbf{p}, \mathbf{q})$ и $w_{Q'Q}^{(2)}(\mathbf{p}, \mathbf{q})$ аналогично формулам (5), (6) следующим образом:

$$W_{Q'Q}^{(2)}(\mathbf{p}) = \int w_{Q'Q}^{(2)}(\mathbf{p}, \mathbf{q}) d^2q, \quad (9)$$

$$D_Q^{(1)\alpha\beta} = \frac{1}{2} \int q_\alpha q_\beta w_Q^{(1)}(\mathbf{p}, \mathbf{q}) d^2q,$$

$$A_Q^{(1)\alpha} = \int q_\alpha w_Q^{(1)}(\mathbf{p}, \mathbf{q}) d^2q + \frac{\partial}{\partial p_\beta} D_Q^{(1)\alpha\beta}, \quad (10)$$

$$D_{Q'Q}^{(2)\alpha\beta} = \frac{1}{2} \int q_\alpha q_\beta w_{Q'Q}^{(2)}(\mathbf{p}, \mathbf{q}) d^2q,$$

$$A_{Q'Q}^{(2)\alpha} = \int q_\alpha w_{Q'Q}^{(2)}(\mathbf{p}, \mathbf{q}) d^2q + \frac{\partial}{\partial p_\beta} D_{Q'Q}^{(2)\alpha\beta}. \quad (11)$$

Первый член в правой части уравнения (8) есть не что иное, как уравнение Фоккера–Планка для функции распределения зарядового состояния Q в пространстве поперечных импульсов. Второй член в правой части (8) представляет собой уравнение баланса по зарядовым состояниям, последний описывает процесс изменения поперечного импульса каналированного иона при многократном рассеянии с одновременным изменением зарядового состояния.

С помощью найденной таким образом функции распределения можно вычислить на заданной глубине z долю каналированных частиц, находящихся в зарядовом

состоянии Q при заданном начальном угле падения пучка относительно направления канала

$$F(Q, z) = \int_{S_Q^2(\mathbf{p})} f_Q(\mathbf{p}, z) d^2p, \quad (12)$$

где область интегрирования $S_Q^2(\mathbf{p})$ по поперечному импульсу ограничена сверху значением критического импульса Линдхарда [11] \mathbf{p}_Q^c , соответствующим зарядовому состоянию Q

$$\mathbf{p}^2/2M_1 \leq (\mathbf{p}_Q^c)^2/2M_1. \quad (13)$$

Наряду с распределением $F(Q, z)$ удобно ввести в рассмотрение нормированное распределение каналированных ионов по зарядовым состояниям и зависящий от глубины проникновения средний заряд

$$N(Q, z) = \frac{F(Q, z)}{\sum_Q F(Q, z)}, \quad Q(z) = \sum_Q Q N(Q, z).$$

Относительную нормированную угловую плотность распределения ионов в различных зарядовых состояниях и угловую плотность распределения полного заряда $Q(\mathbf{p}, z)$ определим следующим образом:

$$g_Q(\mathbf{p}, z) = \frac{f_Q(\mathbf{p}, z)}{\sum_Q f_Q(\mathbf{p}_Q^c, z)}, \quad Q(\mathbf{p}, z) = \sum_Q Q g_Q(\mathbf{p}, z). \quad (14)$$

Относительную плотность потока каналированных частиц $Y(\mathbf{r}, z)$ в точке $\mathbf{r} = (x, y)$ поперечной плоскости канала и пространственное распределение среднего заряда можно вычислить по формулам (см., например, [20]):

$$Y(\mathbf{r}, z) = \sum_Q Y_Q(\mathbf{r}, z), \quad Q(\mathbf{r}, z) = \sum_Q Q Y_Q(\mathbf{r}, z),$$

$$Y_Q(\mathbf{r}, z) = \int_{S_Q^1(\mathbf{p})} \frac{S_0}{S_Q(\mathbf{p})} f_Q(\mathbf{p}, z) d^2p + \chi_Q(z), \quad (15)$$

где $\chi_Q(z)$ — доля деканалированных на глубине z ионов в зарядовом состоянии Q , причем

$$\sum_Q \chi_Q(z) = 1 - \sum_Q F(Q, z),$$

S_0 — площадь элементарной ячейки в поперечной плоскости канала, а интегрирование по поперечным импульсам в (15) осуществляется по области $S_Q^1(\mathbf{p})$, которая определяется условием

$$U_Q(\mathbf{r}) - U_Q^{(\min)} \leq \mathbf{p}^2/M_1 \leq (\mathbf{p}_Q^c)^2/2M_1. \quad (16)$$

Для неканалированных (или надбарьерных) частиц соответствующие функции $F(Q, z)$ и $QA(z)$ можно определить, изменив область интегрирования по поперечному импульсу в (12), ограничив ее значением критического импульса снизу, $|\mathbf{p}| \geq |\mathbf{p}_Q^c|$.

Одноэлектронное приближение

Уравнение (8) представляет собой сложную систему кинетических уравнений, анализ которой представляет существенные трудности. Более того, эти трудности усугубляются необходимостью предварительного вычисления коэффициентов переноса на основе микроскопической теории. Значительно упростить (8) можно, если предположить, что основной вклад в перезарядку вносят процессы с изменением заряда на единицу, т.е. $Q' \rightarrow Q \pm 1$. В этом случае уравнение (8) можно записать в виде

$$\begin{aligned} \frac{\partial f_Q(\mathbf{p}, z)}{\partial z} = & \frac{\partial}{\partial p_\alpha} \left[A_Q^{(1)\alpha} f_Q(\mathbf{p}, z) + D_Q^{(1)\alpha\beta} \frac{\partial}{\partial p_\beta} f_Q(\mathbf{p}, z) \right] \\ & + \left[W_{Q,Q-1}^{(2)}(\mathbf{p}) f_{Q-1}(\mathbf{p}, z) + W_{Q+1,Q}^{(2)}(\mathbf{p}) f_{Q+1}(\mathbf{p}, z) \right. \\ & \left. - W_{Q,Q-1}^{(2)}(\mathbf{p}) f_Q(\mathbf{p}, z) - W_{Q,Q+1}^{(2)}(\mathbf{p}) f_Q(\mathbf{p}, z) \right] \\ & + \frac{\partial}{\partial p_\alpha} \left\{ \left[A_{Q-1,Q}^{(2)\alpha} f_{Q-1}(\mathbf{p}, z) + D_{Q-1,Q}^{(2)\alpha\beta} \frac{\partial}{\partial p_\beta} f_{Q-1}(\mathbf{p}, z) \right] \right. \\ & \left. + \left[A_{Q+1,Q}^{(2)\alpha} f_{Q+1}(\mathbf{p}, z) + D_{Q+1,Q}^{(2)\alpha\beta} \frac{\partial}{\partial p_\beta} f_{Q+1}(\mathbf{p}, z) \right] \right\}. \quad (17) \end{aligned}$$

Далее учтем, что процессы захвата и потери электрона ионом являются быстрыми и происходят на интервалах порядка нескольких сотен \AA [13], что значительно меньше, чем характерная длина многократного рассеяния ионов в кристалле (которая составляет несколько тысяч \AA). В этом случае, если ввести в рассмотрение вероятности захвата и потери электрона ионом, то плотность вероятности $w_{QQ'}^{(2)}(\mathbf{p}, \mathbf{q})$ в соотношении (7) в одноэлектронном приближении можно записать в виде

$$\begin{aligned} w_{Q,Q+1}^{(2)}(\mathbf{p}, \mathbf{q}) &= P_Q^l(\mathbf{p}) w_{Q+1}^{(1)}(\mathbf{p}, \mathbf{q}), \\ w_{Q,Q-1}^{(2)}(\mathbf{p}, \mathbf{q}) &= P_Q^c(\mathbf{p}) w_{Q-1}^{(1)}(\mathbf{p}, \mathbf{q}), \quad (18) \end{aligned}$$

$$P_Q^{c,l}(\mathbf{p}) = \frac{1}{S_Q(\mathbf{p})} \int_{S_Q(\mathbf{p})} P_Q^{c,l}(\mathbf{r}) d^2 r, \quad (19)$$

где $P_Q^c(\mathbf{r})$ и $P_Q^l(\mathbf{r})$ — зависящие от прицельного параметра вероятности захвата и потери электрона ионом соответственно. Соотношения (14) позволяют найти связь между кинетическими коэффициентами (9), (10) и (11). Отнесенную к единице глубины вероятность перезарядки $W_{Q,Q'}^{(2)}(\mathbf{p})$ в этом приближении можно записать в виде

$$\begin{aligned} W_{Q,Q+1}^{(2)}(\mathbf{p}) &= \frac{1}{L_{Q+1}(\mathbf{p})} P_Q^l(\mathbf{p}), \\ W_{Q,Q-1}^{(2)}(\mathbf{p}) &= \frac{1}{L_{Q-1}(\mathbf{p})} P_Q^c(\mathbf{p}), \quad (20) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} W_{Q-1,Q}^{(2)}(\mathbf{p}) &= \frac{1}{L_Q(\mathbf{p})} P_{Q-1}^l(\mathbf{p}), \\ W_{Q+1,Q}^{(2)}(\mathbf{p}) &= \frac{1}{L_Q(\mathbf{p})} P_{Q+1}^c(\mathbf{p}), \quad (21) \end{aligned}$$

где $1/L_Q(\mathbf{p}) = \int w_Q^{(1)}(\mathbf{p}, \mathbf{q}) d^2 q$, а $L_Q(\mathbf{p})$ определяет длину свободного пробега между двумя последовательными соударениями каналированного иона с поперечным импульсом \mathbf{p} , находящимся в зарядовом состоянии Q . Обобщенные коэффициенты диффузии $D_{Q'Q}^{(2)\alpha\beta}$ и динамического трения $A_{Q'Q}^{(2)\alpha}$ выражаются через обычные кинетические коэффициенты

$$\begin{aligned} D_{Q-1,Q}^{(2)\alpha\beta} &= P_{Q-1}^l(\mathbf{p}) D_Q^{(1)\alpha\beta}, \quad D_{Q+1,Q}^{(2)\alpha\beta} = P_{Q+1}^c(\mathbf{p}) D_Q^{(1)\alpha\beta}, \\ A_{Q-1,Q}^{(2)\alpha} &= P_{Q-1}^l(\mathbf{p}) A_Q^{(1)\alpha}, \quad A_{Q+1,Q}^{(2)\alpha} = P_{Q+1}^c(\mathbf{p}) A_Q^{(1)\alpha}. \quad (22) \end{aligned}$$

Упростим выражения для коэффициента динамического трения $A_Q^{(1)\alpha}$ и коэффициента диффузии $D_Q^{(1)\alpha\beta}$ (в дальнейшем верхний индекс (1) у $A_Q^{(1)\alpha}$ и $D_Q^{(1)\alpha\beta}$ будем опускать). Прежде всего, предположим, что зависящая от прицельного параметра плотность вероятности $w_{QQ'}(\mathbf{r}, \mathbf{p}, \mathbf{q})$ зависит от модуля переданного импульса $q = |\mathbf{p} - \mathbf{p}'|$, это соответствует предположению изотропности процесса рассеяния. Далее учтем, что площадь доступной области в силу определения (2) зависит только от модуля поперечного импульса \mathbf{p} . Это означает, что плотность вероятности $w_{QQ'}^{(1)}(\mathbf{p}, \mathbf{q})$, а также вероятность захвата $P_Q^c(\mathbf{p})$ (и потери $P_Q^l(\mathbf{p})$) электрона ионом и длина свободного пробега $L_Q(\mathbf{p})$ будут зависеть только от модулей векторов \mathbf{p} и \mathbf{q} . В этом случае очевидно, что коэффициент диффузии $D_Q^{\alpha\beta}$ будет диагонален по индексам α и β , а линейный член в коэффициенте динамического трения A_Q^α будет равен нулю:

$$D_Q^{\alpha\beta}(\mathbf{p}) = D_Q(\mathbf{p}) \delta_{\alpha\beta}, \quad A_Q(\mathbf{p}) = \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} D_Q(\mathbf{p}), \quad (23)$$

$$D_Q(\mathbf{p}) = \frac{1}{4} \int \mathbf{q}^2 w_Q^{(1)}(\mathbf{p}, \mathbf{q}) d^2 q. \quad (24)$$

Таким образом, система кинетических уравнений, описывающая диффузию и перезарядку каналированных ионов в пространстве поперечных импульсов в одноэлектронном приближении, запишется следующим образом:

$$\begin{aligned} \frac{\partial f_Q(\mathbf{p}, z)}{\partial z} = & \text{div} [A_Q(\mathbf{p}) f_Q(\mathbf{p}, z) + D_Q(\mathbf{p}) \text{grad} f_Q(\mathbf{p}, z)] \\ & + \text{div} \left\{ P_{Q-1}^l(\mathbf{p}) [A_Q(\mathbf{p}) f_{Q-1}(\mathbf{p}, z) + D_Q(\mathbf{p}) \text{grad} f_{Q-1}(\mathbf{p}, z)] \right\} \\ & + \text{div} \left\{ P_{Q+1}^c(\mathbf{p}) [A_Q(\mathbf{p}) f_{Q+1}(\mathbf{p}, z) + D_Q(\mathbf{p}) \text{grad} f_{Q+1}(\mathbf{p}, z)] \right\} \\ & + \left[\frac{P_{Q+1}^c(\mathbf{p}) f_{Q+1}(\mathbf{p}, z)}{L_Q(\mathbf{p})} + \frac{P_{Q-1}^l(\mathbf{p}) f_{Q-1}(\mathbf{p}, z)}{L_Q(\mathbf{p})} \right. \\ & \left. - \frac{P_Q^c(\mathbf{p}) f_Q(\mathbf{p}, z)}{L_{Q-1}(\mathbf{p})} - \frac{P_Q^l(\mathbf{p}) f_Q(\mathbf{p}, z)}{L_{Q+1}(\mathbf{p})} \right]. \quad (25) \end{aligned}$$

Первый член в правой части уравнения (25) представляет собой обычное уравнение Фоккера–Планка, второй и третий описывают „обобщенную“ диффузию в пространстве поперечных импульсов, происходящую с изменением зарядового состояния иона, а последний — обычное уравнение баланса по зарядовым состояниям.

Кинетические коэффициенты

Коэффициенты диффузии $D_Q(\mathbf{p})$

В соответствии с определениями (1), (10), (20) коэффициент диффузии в уравнении (25) можно определить как среднее по доступной области от коэффициента диффузии, зависящего от пространственных поперечных координат [18–20]:

$$D_Q(\mathbf{p}) = \frac{1}{S_Q(\mathbf{p})} \int_{S_Q(\mathbf{p})} D_Q(\mathbf{r}) d^2r, \quad (26)$$

$$D_Q(\mathbf{r}) = \frac{1}{4} \int \mathbf{q}^2 w_{QQ}(\mathbf{r}, \mathbf{q}) d^2q. \quad (27)$$

Процесс деканалирования в идеальном кристалле, не имеющем структурных нарушений, происходит из-за возбуждения электронов кристалла и вследствие рассеяния на тепловых колебаниях атомов кристаллической решетки (возбуждение фононов), т. е.

$$D_Q(\mathbf{r}) = D_Q^e(\mathbf{r}) + D_Q^n(\mathbf{r}).$$

Диффузионные способности $D_Q^e(\mathbf{r})$, $D_Q^n(\mathbf{r})$ могут быть вычислены по известным формулам (см., например, [20,21]):

$$D_Q^e(\mathbf{r}) = \frac{2\pi Q^2 e^4}{v^2} L_e L_n(\mathbf{r}),$$

$$D_Q^n(\mathbf{r}) = \frac{2\pi Q^2 Z_2^2 e^4}{v^2} L_n N_n(\mathbf{r}), \quad (28)$$

где v — скорость налетающих частиц, Z_2 — атомный номер атомов кристалла, $N_e(\mathbf{r})$ — распределение электронной плотности по сечению канала, которое в доступной области можно найти из распределения потенциала в соответствии с уравнением Пуассона, $N_n(\mathbf{r})$ — пространственное распределение атомов кристалла данного сорта в поперечной плоскости, обусловленное тепловыми колебаниями. Логарифмические множители в (28) определены следующим образом:

$$L_e = \ln \left(\frac{2m_e v^2}{I} \right), \quad L_n = \ln \left(1.29 \frac{aE}{QZ_2 e^2} \frac{M_2}{M_1 + M_2} \right),$$

где I — средняя энергия возбуждения атомов мишени, m_e — масса электрона, E — энергия налетающих частиц, a — радиус экранирования, M_2 — масса атомов в кристалле. При малых поперечных импульсах

определяющим фактором диффузии является рассеяние на электронах кристалла. При увеличении поперечного импульса доступная область каналирования приближается к атомным цепочкам и преобладающим становится рассеяние на ядрах. Дальнейшее увеличение поперечного импульса уже не приводит к увеличению площади доступной области, так как достигается ее максимальное значение, и коэффициенты диффузии остаются постоянными [17–20].

Вероятности захвата и потери электрона $P_Q^{cl}(\mathbf{p})$

Вычисление вероятностей $P_Q^{cl}(\mathbf{p})$ представляет собой довольно сложную задачу. Для наших целей можно воспользоваться полуэмпирическими формулами. Следуя работе [13], для вероятностей захвата и потери электрона ионом запишем следующие приближенные выражения (в отличие от работы [13] в формулах (29), (30) проведено усреднение по тепловым колебаниям атомов кристаллической решетки):

$$P_Q^c(\mathbf{p}) = \left\{ 1 + \frac{2}{\pi} \arctg \left[\frac{\pi}{2} a(Q - Q_0) \right] \right\} \times \int f^c(\mathbf{r}_s + \mathbf{u} - \mathbf{r}) \Phi(\mathbf{u}) d^2u, \quad (29)$$

$$P_Q^l(\mathbf{p}) = \left\{ 1 - \frac{2}{\pi} \arctg \left[\frac{\pi}{2} a(Q - Q_0) \right] \right\} \times \int f^l(\mathbf{r}_s + \mathbf{u} - \mathbf{r}) \Phi(\mathbf{u}) d^2u, \quad (30)$$

где $a \approx 0.5$, Q_0 — равновесное зарядовое состояние иона при движении в неориентированном кристалле, \mathbf{r}_s — координата атомной цепочки в канале, \mathbf{u} — величина смещений атомов из положения равновесия в плоскости, перпендикулярной направлению оси, вследствие тепловых колебаний, $\Phi(\mathbf{u})$ — функция распределения атомов кристалла по тепловым колебаниям, а функции $f^c(\mathbf{r}_s + \mathbf{u} - \mathbf{r})$ и $f^l(\mathbf{r}_s + \mathbf{u} - \mathbf{r})$ заданы соотношениями [13]:

$$f^c(\mathbf{r}_s + \mathbf{u} - \mathbf{r}) = \theta(r_c - |\mathbf{r}_s + \mathbf{u} - \mathbf{r}|),$$

$$f^l(\mathbf{r}_s + \mathbf{u} - \mathbf{r}) = \frac{r_c^2}{2\lambda^2} \exp(-|\mathbf{r}_s + \mathbf{u} - \mathbf{r}|/\lambda). \quad (31)$$

Значение прицельного параметра r_c , при котором, например, происходит захват электрона с L -оболочки атома Si ионом Al с энергией 48 MeV согласно оценкам, проведенным в [13], равно 0.2 Å, для этого случая $\lambda = 0.3$ Å, а $Q_0 = 10$. Для ионов с энергией 13.5 MeV эти параметры соответственно равны 0.38 и 0.17 Å, $Q_0 = 8$ (см. [17]). Для нейтральных атомов вероятность захвата электрона полагается равной нулю, а вероятность потери электрона — равной максимальному значению для $P_1^l(\mathbf{p})$. Последнее допущение вполне оправдано, поскольку доступная область для нейтральных

атомов равна максимальному значению, т.е. площади элементарной ячейки в поперечной плоскости канала, и соответствующая вероятность не зависит от величины поперечного импульса.

Длина свободного пробега $L_Q(\mathbf{p})$

Аналогично процедуре вычисления коэффициентов диффузии запишем обратную длину свободного пробега в виде среднего по доступной области

$$1/L_Q(\mathbf{p}) = \frac{1}{S_Q(\mathbf{p})} \int_{S_Q(\mathbf{p})} d^2r \int w_{QQ}(\mathbf{r}, \mathbf{q}) d^2q, \quad (32)$$

а зависящий от координаты интеграл по преданному импульсу в (32) представим в виде

$$\int w_{QQ}(\mathbf{r}, \mathbf{q}) d^2q = \sigma_Q^{(e)} N_e(\mathbf{r}) + \sigma_Q^{(n)} N_n(\mathbf{r}), \quad (33)$$

где $\sigma_Q^{(e)}, \sigma_Q^{(n)}$ — полные сечения возбуждения валентных электронов и упругого рассеяния на атомах кристалла соответственно. Для определения сечения σ_Q^e воспользуемся моделью Томсона, согласно которой

$$\sigma_Q^{(e)} = \frac{\pi Q^2 e^4}{I^2} \left(\frac{I}{E} - \frac{I^2}{E^2} \right). \quad (34)$$

Полное сечение упругого рассеяния иона на атоме кристалла $\sigma_Q^{(n)}$ запишем следующим образом:

$$\sigma_Q^{(n)} = 3.5 \cdot 10^4 \pi Q^2 Z_2^{1/3} (Z_2 + 1) r_e^2 \frac{M_1 c^2}{E}, \quad (35)$$

где r_e — классический радиус электрона, $r_e = e^2/m_e c^2$.

Обсуждение результатов численного решения

Для формулировки нестационарной краевой задачи необходимо определить при $z = 0$ начальное условие, которое зададим изотропным распределением по поперечным импульсам и распределением Пуассона по зарядовым состояниям вблизи равновесного значения $Q = Q_0$. Граничное условие для уравнения (8) можно задать в виде $f_Q(\mathbf{p}_Q^c, z) = 0$. Однако при таком граничном условии не учитывается процесс возврата частиц из хаотической компоненты пучка в режим каналирования. Для учета этого эффекта граничное условие удобно записать в виде $f_Q(\mathbf{p}^b, z) = 0$, где \mathbf{p}^b — значение некоторого „граничного“ импульса, величина которого больше критического, $\mathbf{p}^b \approx K \mathbf{p}_{Q_{\max}}^c$, $K > 1$ (см., например, [20]). Для определения потенциала $U_Q(\mathbf{r})$ в поперечной плоскости использовалась аппроксимация Мольера для изолированной атомной цепочки.

Коэффициенты диффузии $D_Q(\mathbf{p})$ при значениях поперечного импульса вблизи критического имеют разрывы первого рода. Поэтому для численного решения уравнения переноса (25) самым эффективным и

надежным методом в данном случае является интегро-интерполяционный способ построения разностных схем, который и использовался при численном решении системы уравнений (25). Расчеты проводились для квазиизотропного пучка ионов Al с энергией 48 и 13.5 MeV в кристалле кремния вдоль оси $\langle 100 \rangle$ и для различных глубин проникновения ионов в кристалл.

На рис. 1 показаны функции распределения для различных зарядовых состояний. Результирующее угловое распределение прошедших кристалл ионов формируется

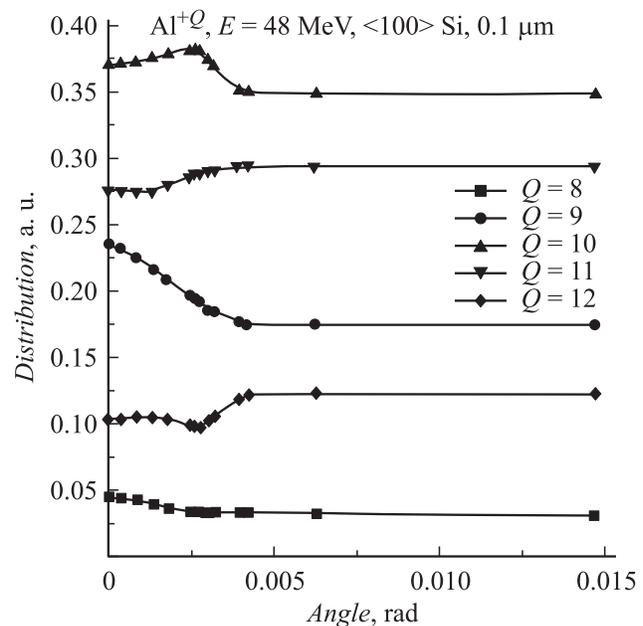
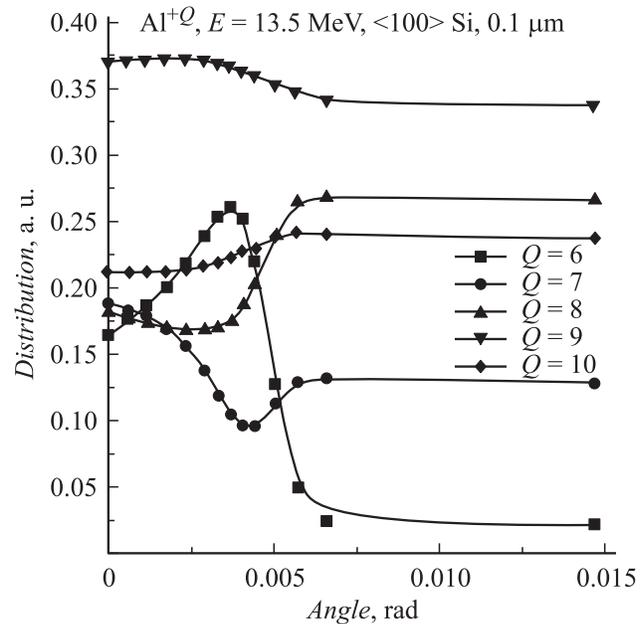


Рис. 1. Парциальные угловые распределения каналированных ионов Al в кристалле кремния.

всеми парциальными распределениями. При этом, как было показано в [17], суммарное распределение для ионов с энергией 48 MeV имеет максимум при нулевом значении поперечного импульса (эффект „охлаждения“). Для ионов с энергией 13.5 MeV рассчитанное суммарное распределение имеет более сложную структуру, с выходом в нуле меньше, чем при неориентированном движении ионов в кристалле [17] (эффект „нагрева“). Средний заряд, рассчитанный для хаотической компоненты пучка ионов равен $Q_r = 10.4$ для ионов с энергией 48 MeV и $Q_r = 8.7$ для ионов с энергией 13.5 MeV. Интересно обратить внимание на следующее обстоятельство. Например, при энергии ионов 48 MeV угловые распределения, соответствующие зарядовым состояниям $Q = 7, 8, 9$ и 10 , содержат максимум при малых углах, а распределения с $Q = 11, 12$ и 13 содержат минимум. При этом общей особенностью состояний с меньшими зарядами $Q = 7, 8, 9$ и 10 является то, что для этих состояний вероятности потери электрона больше вероятности захвата (см. рис. 2 в [17]). А общей особенностью состояний с большими зарядами $Q = 11, 12$ и 13 является то, что для этих состояний вероятности захвата электрона оказываются больше вероятности потери. Поскольку при энергии ионов 48 MeV наблюдается эффект охлаждения [9,10], то мы приходим к выводу, что преимущественный вклад в максимум углового распределения при нулевом угле вылета дают состояния с зарядом меньше равновесного Q_0 при данной энергии $Q = 7, 8, 9$ и 10 , для которых вероятности потери электрона больше вероятности захвата. При меньшей энергии ионов 13.5 MeV характер углового распределения более сложный (см. рис. 6 в [17]), а именно при общей тенденции к нагреву имеется небольшой максимум при нулевом угле. Преимущественный вклад в минимум углового распределения дают состояния с зарядом больше равновесного Q_0 при данной энергии $Q = 8, 9$ и 10 , для которых вероятности потери электрона меньше вероятности захвата. Таким образом, можно сделать общий вывод, что имеется тенденция к охлаждению пучка ионов, если средний заряд канализованных ионов больше равновесного и к нагреву — если меньше. Аналогичная закономерность была установлена экспериментально в [10].

На рис. 2 показана угловая плотность распределения заряда, рассчитанная по формулам (14). Отличие в распределении заряда ионов при энергии 13.5 и 48 MeV 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. Поэтому эффективность захвата электронов кристалла при малых поперечных импульсах оказывается большей для ионов с энергией 13.5 MeV, чем для ионов с энергией 48 MeV, что и объясняет уменьшение плотности распределения заряда при малых поперечных импульсах ионов с энергией 13.5 MeV. Именно это обстоятельство и приводит к уменьшению среднего заряда в канале при более низких энергиях ионов. Пространственное

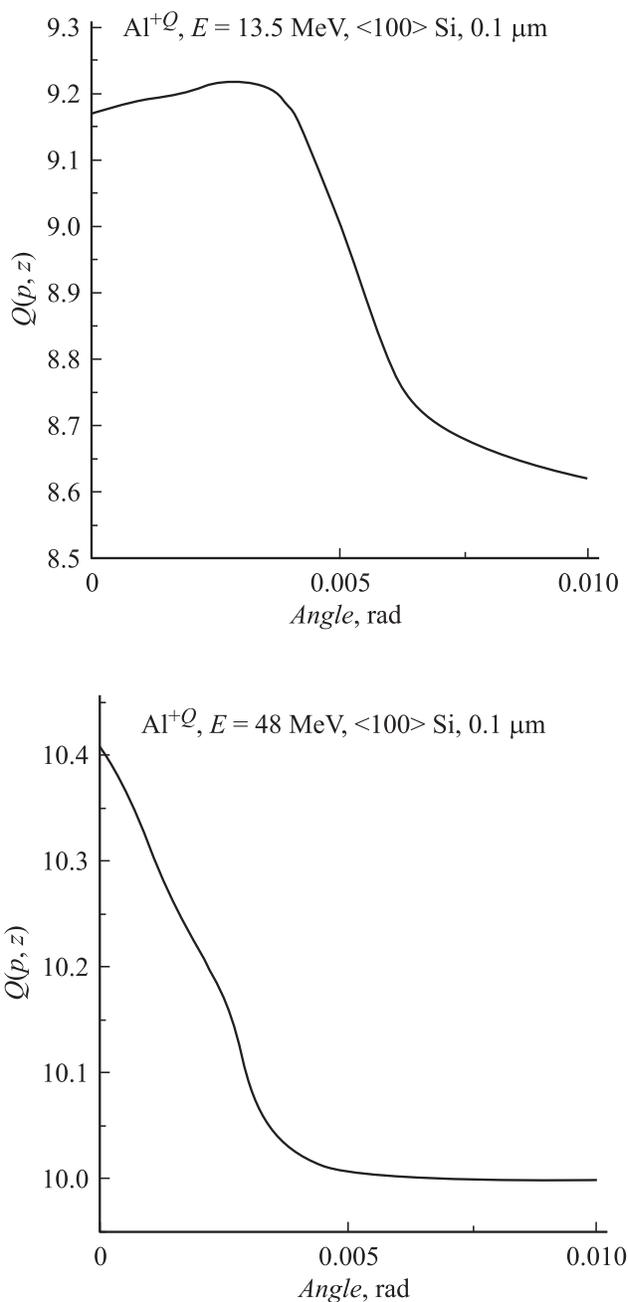


Рис. 2. Угловая плотность распределения заряда канализованных ионов Al в кристалле кремния.

распределение среднего заряда, вычисленное по распределению плотности потока канализованных ионов (15), показано на рис. 3. Для сравнения на рис. 4 показано распределение плотности потока канализованных ионов. Значение среднего заряда в некоторой пространственной точке в поперечной плоскости формируется всеми ионами, имеющими поперечные импульсы в диапазоне от нуля до критического. Рассчитанное значение среднего заряда по сечению канала при энергии ионов 13.5 MeV оказывается несколько меньше среднего заряда при хаотическом движении и равно $Q_{ch} = 8.3$. Рассчитанный

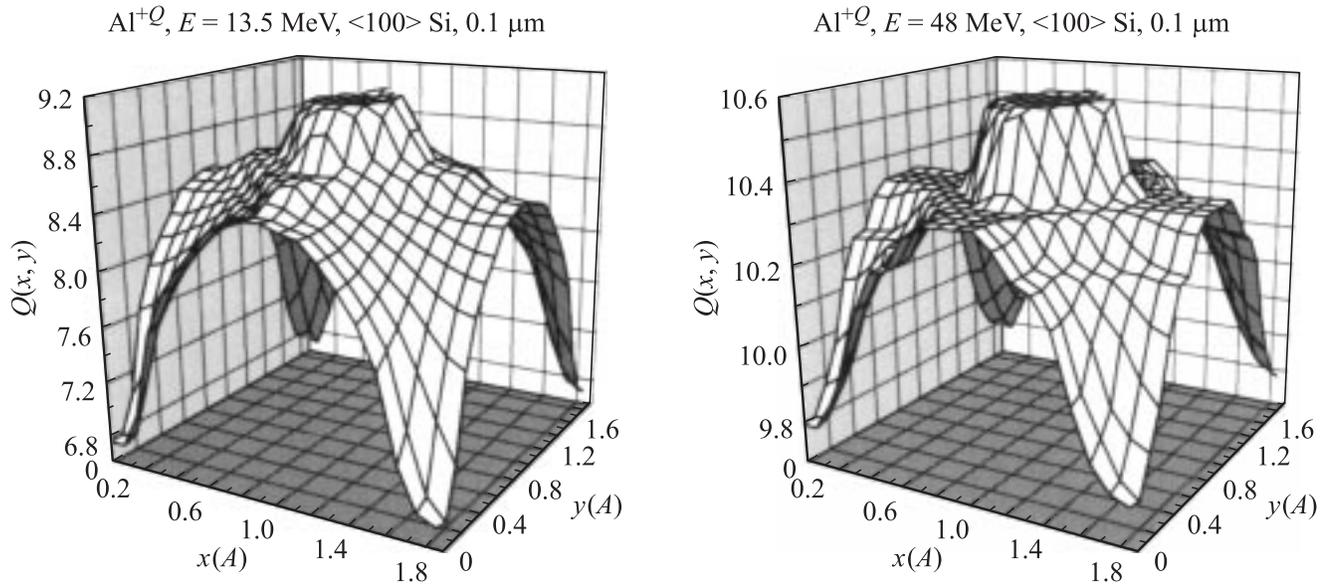


Рис. 3. Пространственное распределение заряда каналированных ионов Al в поперечной плоскости канала $\langle 100 \rangle$ кремния.

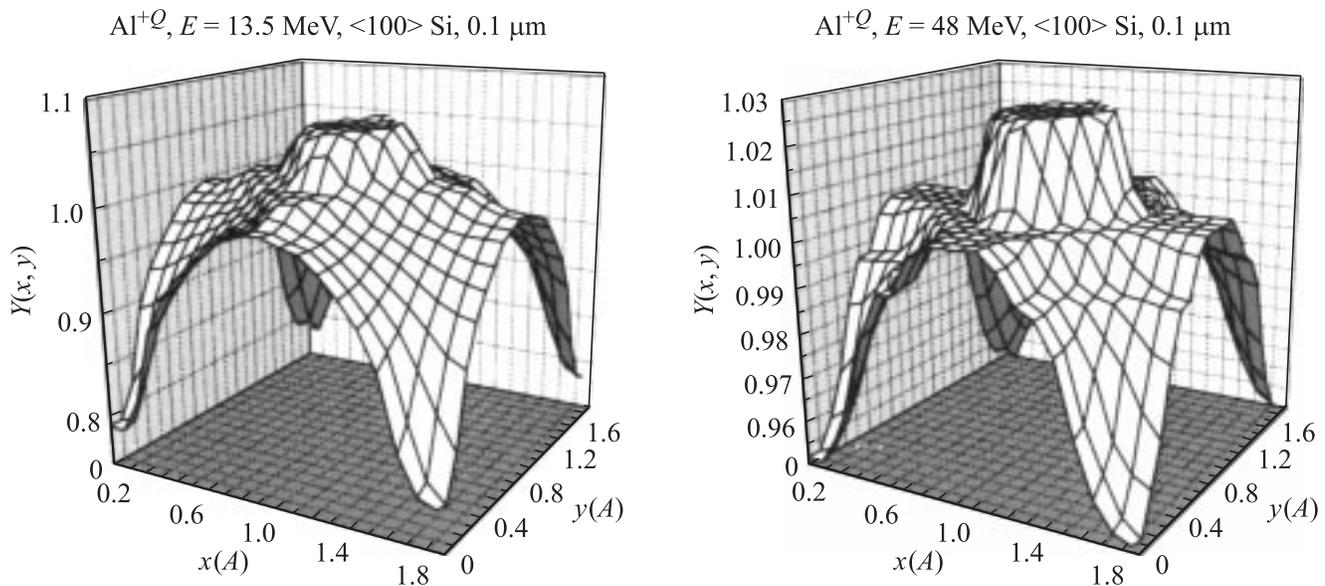


Рис. 4. Распределение плотности потока каналированных ионов Al в поперечной плоскости канала $\langle 100 \rangle$ кремния.

средний заряд в канале при энергии 48 MeV равен $Q_{ch} = 10.3$. В противоположность энергии 13.5 MeV, разница в среднем заряде каналированной и неканалированной компонент пучка при энергии 48 MeV оказывается не столь значительной.

Таким образом, проявление эффектов „охлаждения“ или „нагрева“ изотропных пучков тяжелых многозарядных ионов определяется зависимостью вероятностей захвата и потери электронов от прицельного параметра при взаимодействии ионов с атомными цепочками, что

и определяет характер углового и пространственного распределения заряда каналированных ионов.

Список литературы

- [1] Bohr N., Lindhard J. // Dan. Fys. Medd. 1954. Vol. 28. N 7.
- [2] Betz H.D. // Rev. Mod. Phys. 1972. Vol. 44. P. 465.
- [3] Shima K., Kuno N., Yamanouchi M. // Phys. Rev. A. 1987. Vol. 40. P. 3557.

- [4] *Shima K., Kuno N., Yamanouchi M., Tawara H.* // Atomic Data and Nuclear Data Tables. 1992. Vol. 51. P. 173.
- [5] *Assmann W., Huber H., Karamian S.A.* et al. // Phys. Rev. Lett. 1999. Vol. 83. P. 1759.
- [6] *Karamian S.A., Assmann W., Ertl K.* et al. // Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. B. 2000. Vol. 164–165. P. 61.
- [7] *Gruner F., Schubert M., Assmann W.* // Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. B. 2000. Vol. 193. P. 165.
- [8] *Karamian S.A., Gruner F., Assmann W.* et al. // Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. B. 2002. Vol. 193. P. 144.
- [9] *Schubert M., Gruner F., Assmann W.* et al. // Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. B. 2003. Vol. 209. P. 224.
- [10] *Gruner F., Assmann W., Bell F.* et al. // Phys. Rev. B. 2003. Vol. 68. P. 174104.
- [11] *Lindhard J.* // Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk. 1965. Vol. 34. N 14.
- [12] *Jakubařa-Amundsen D.H.* // Phys. Rev. B. 2002. Vol. 65. P. 174110.
- [13] *Andersen J.U., Gruner F., Ryabov V.A., Uguzzoni A.* // Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. B. 2002. Vol. 193. P. 118.
- [14] *Гранкина Т.В., Похил Г.П., Чердынцев В.В.* // Поверхность. 2005. № 4. С. 20.
- [15] *Beloshitsky V.V., Komarov F.F., Kumakhov M.A.* // Phys. Rep. 1986. Vol. 139. P. 293.
- [16] *Gemmel B.S.* // Rev. Mod. Phys. 1974. Vol. 46. P. 129.
- [17] *Malyshevsky V.S.* // Phys. Rev. B. 2005. Vol. 72. P. 094109.
- [18] *Borovik A.S., Malyshevsky V.S., Rahimov S.V.* // Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. B. 2004. Vol. 226. P. 385.
- [19] *Borovik A.S., Epiphanov A.A., Malyshevsky V.S., Makarov V.I.* // Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. B. 1993. Vol. 73. P. 512.
- [20] *Borovik A.S., Epiphanov A.A., Korneev D.A., Malyshevsky V.S.* // Preprint JINR. 1992. P14-92-396.
- [21] *Оцуки Е.Х.* Взаимодействие заряженных частиц с твердыми телами. М.: Мир, 1985. 280 с.