

РАССЕЯНИЕ МНОГОЗАРЯДНЫХ ИОНОВ В ОРИЕНТИРОВАННЫХ КРИСТАЛЛАХ

В.С. Малышевский, Д.А. Трухов

Южный Федеральный университет, факультет физики,
344090, Ростов-на-Дону, ул. Зорге, 5
e-mail: vmalysh@phys.rsu.ru

Проведено численное моделирование процесса рассеяния ускоренных многозарядных ионов при осевом каналировании в кристаллах. Исследованы угловые распределения коллимированных пучков ионов после прохождения кристаллов вдоль осевого направления. Установлена ориентационная зависимость среднего угла многократного рассеяния многозарядных ионов на атомных цепочках от угла влета частиц в кристалл. Показано, что угол многократного рассеяния ионов при осевом каналировании превосходит угол многократного рассеяния при движении в соответствующей аморфной среде. Исследовано влияние процессов перезарядки на угловые распределения коллимированных и квазиизотропных пучков многозарядных ионов после прохождения ориентированных кристаллов и дана интерпретация обнаруженным недавно эффектам охлаждения и нагрева пучков ионов.

Ключевые слова: многозарядные ионы, каналирование, многократное рассеяние, математическое моделирование.

Введение

Пристальное внимание к исследованиям электромагнитных взаимодействий заряженных частиц с кристаллами обусловлено предсказанием и обнаружением ряда неизвестных ранее физических эффектов, которые открыли новые возможности не только в изучении фундаментальных закономерностей во взаимодействии частиц с веществом, но и в области прикладной физики. История открытия и изучения многих из них насчитывает уже не один десяток лет и к настоящему времени накоплен большой теоретический и экспериментальный материал в этой области физики (см., например, [1]).

В связи с появившимися в последнее время техническими возможностями получать и ускорять до высоких энергий тяжелые многозарядные ионы интерес к проблеме использования пучков таких ионов в ядерной физике и физике конденсированных состояний значительно возрос. Взаимодействие ускоренных многозарядных ионов с ориентированными кристаллами приводит к ряду новых эффектов, которые требуют дополнительного теоретического изучения. Это связано с тем, что при проникновении многозарядного иона в твердое тело его зарядовое состояние быстро изменяется благодаря обмену электронами между ионом и твердым телом, что в свою очередь изменяет характер взаимодействия иона со средой. Интерес к этому явлению был впервые проявлен Н. Бором [2] и не ослабевает до сих пор.

На сегодняшний день наиболее надежным способом количественного описания таких режимов движения ионов через кристаллы является математическое моделирование процессов ион-атомных соударений, в том числе сопровождающихся перезарядкой ионов. В настоящей работе методами математического моделирования рассмотрены некоторые особенности каналирования многозарядных ионов в кристаллах.

1. Осевое каналирование многозарядных ионов

Рассмотрим особенности осевого каналирования многозарядных ионов в кристалле кремния. Структура осевых каналов $\langle 110 \rangle$ и $\langle 100 \rangle$ показана на рис. 1.

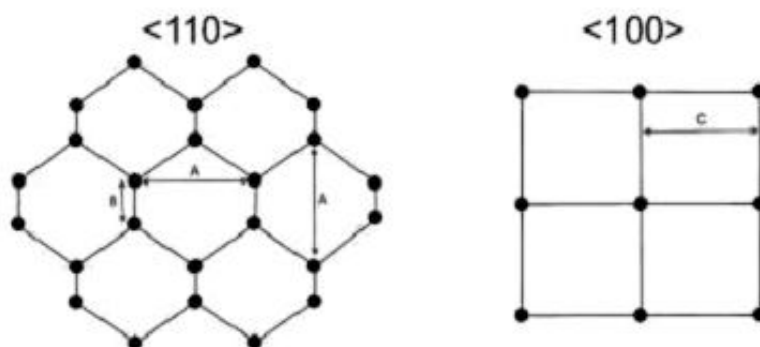


Рис.1. Структура осевых каналов кремния вдоль направления $\langle 110 \rangle$ и $\langle 100 \rangle$, $A = 4\text{Å}$, $B = 1.5\text{Å}$, $C = 1.9\text{Å}$

Основная идея, существенно упрощающая теоретический анализ эффекта каналирования в целом, состоит в замене истинного потенциала атомов кристалла потенциалом, усредненным по координатам вдоль кристаллографического направления [3]. Такое приближение особенно эффективно, если угол падения частицы на ось или плоскость достаточно мал. Основа непрерывного приближения заключается в предположении, что в отклонение траектории дают вклад много последовательных атомов. При этом закономерности движения частицы в кристалле будут отличаться от закономерностей ее движения в аморфном веществе. При движении вдоль атомных цепочек в непрерывном приближении вводится средний потенциал на расстоянии r от оси цепочки, т.е.

$$U(r) = \frac{1}{d} \int_{-\infty}^{+\infty} V(R = \sqrt{z^2 + r^2}) dz, \quad (1)$$

где $V(R)$ – ионно-атомный потенциал и d – расстояние между атомами в цепочке.

Уравнения движения, описывающие поперечное движение каналированных нерелятивистских ионов в осевом канале кристалла, имеют вид:

$$\begin{aligned} dp_x / dt &= F_x(x, y), & dp_y / dt &= F_y(x, y), \\ dx / dt &= p_x / M_i, & dy / dt &= p_y / M_i, \end{aligned} \quad (2)$$

где p_x и p_y компоненты поперечного импульса, $F_x(x, y)$ и $F_y(x, y)$ – компоненты силы, действующей на ион массой M_i в канале, $F_x(x, y) = -\partial U(x, y) / \partial x$, $F_y(x, y) = -\partial U(x, y) / \partial y$. Потенциальная энергия не зависит от продольной координаты z , поэтому соответствующая компонента импульса сохраняется.

Потенциальную энергию иона в поле отдельной атомной цепочки на расстоянии r от нее будем аппроксимировать формулой Дойля-Тёрнера [4]:

$$U(r) = \frac{Z_i e^2}{a_0} \frac{2a_0^2}{d} \sum_{i=1}^4 \frac{a_i}{B_i + u_{\perp}^2} \exp\left[-\frac{r^2}{B_i + u_{\perp}^2}\right] \quad (3)$$

где Zie – заряд каналированного иона, a_0 – Борковский радиус, u_{\perp}^2 – среднеквадратичная амплитуда тепловых колебаний атомов кристалла в поперечном направлении, d – продольный период атомов в цепочке. Константы a_i и $B_i = b_i/(2\pi)^2$ зависят от типа кристалла. Параметры потенциала для кристалла кремния (размерность величин: $[a_i]=\text{Å}$, $[b_i]=\text{Å}^2$, $[\sqrt{u_{\perp}^2}]=\text{Å}$) приведены в таблице:

a_1	b_1	a_2	b_2	a_3	b_3	a_4	b_4	$\sqrt{\langle u_{\perp}^2 \rangle}$
2.1293	57.7748	2.5373	16.4756	0.8349	2.8796	0.3216	0.3860	0.075

Потенциальная энергия иона в канале является суперпозицией потенциальных энергий в поле отдельных цепочек и для направления $\langle 110 \rangle$ в кристалле кремния показана на рис. 2.

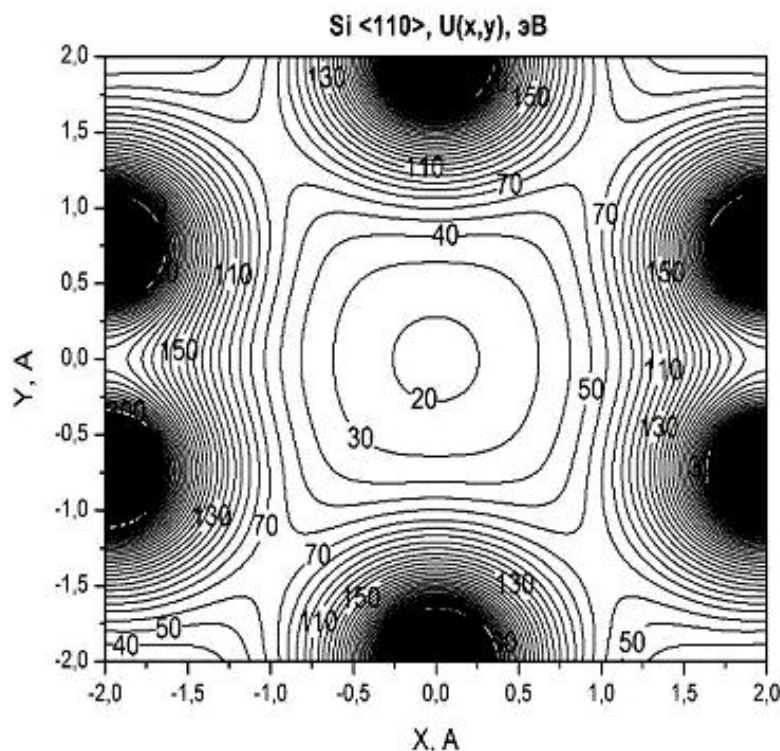


Рис. 2. Распределение потенциала в поперечной плоскости осевого канала $\langle 110 \rangle$ кремния

Система уравнений (2) в потенциальном поле, образованном отдельными цепочками (3), решалась численно методом Рунге-Кутты четвертого порядка. При решении системы уравнений начальные условия задавались в виде координаты точки влета и начального угла относительно атомных цепочек. При моделировании прохождения пучка ионов через ориентированный кристалл координаты начальной точки генерировались случайным образом. При анализе прохождения квазиизотропных пучков через кристалл начальный угол влета также генерировался случайным образом. В зависимости от задаваемых начальных условий в канале реализуются различные по характеру траектории. Траектории могут быть финитными, т.е. ограниченными в пределах одно-

го канала, или нерегулярными, т.е. пересекающими несколько каналов при движении через кристалл. Пример таких траекторий показан на рис. 3 и 4.

U^{91} , 20 MeV/n, Si <110> 11.7 mkm

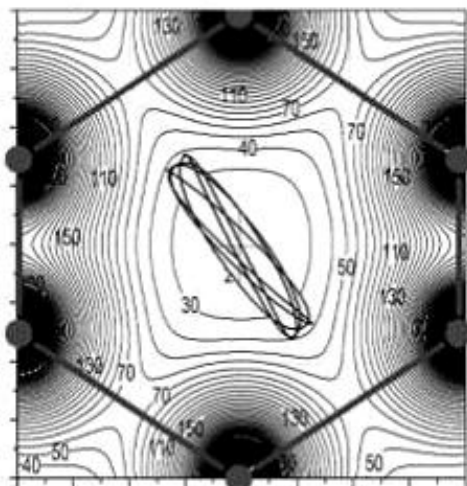


Рис.3. Поперечная траектория иона при нулевом угле влета вдоль осевого канала <110> кремния и точке влета вблизи центра канала

U^{91} , 20 MeV/n, Si <110> 11.7 mkm

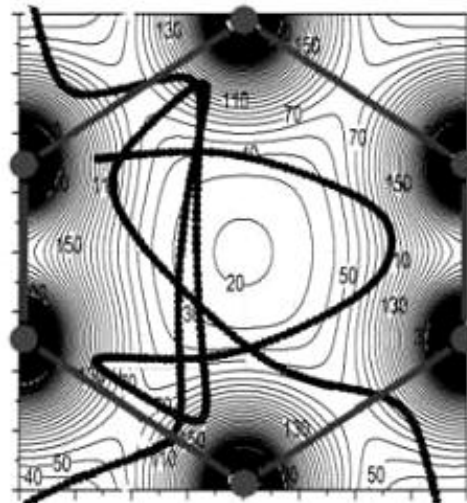


Рис.4. Поперечные траектории ионов при нулевом угле влета вдоль осевого канала <110> кремния и точке влета вблизи атомной цепочки

2. Моделирование процессов перезарядки

Исследованию равновесных зарядовых состояний ускоренных ионов при их прохождении через аморфные твердые тела посвящено достаточно много работ [например, 5-7], в которых достигнут значительный прогресс в понимании наблюдаемых закономерностей. К сожалению, детальные расчеты динамики каналирования многозарядных ионов с учетом эффектов перезарядки упираются в знание сечений соответствующих процессов и их зависимости от прицельного параметра. Существующая теория ион-атомных столкновений, хотя и развивается интенсивно в настоящее время, тем не менее, еще не дает надежных данных относительно вероятностей перезарядки ионов в кристаллах и их зависимости от прицельного параметра. Поэтому для оценок зависящих от текущего заряда иона q сечений захвата $\sigma_c(q)$ и потери $\sigma_l(q)$ электронов можно использовать аппроксимацию Бора и Линдхарда [8]. С учетом эмпирических поправок, приведенных в работе [9], указанные формулы неплохо согласуются с имеющимися экспериментальными данными в широком диапазоне энергий.

Значения сечений определяют характерный прицельный параметр захвата $\rho_c(q) = \sqrt{\sigma_c(q)} / \pi$ или потери $\rho_l(q) = \sqrt{\sigma_l(q)} / \pi$ электрона. Для различных энергий и ионов соответствующие сечения и прицельные параметры приведены на рис. 5 и 6. Предлагаемый алгоритм, который позволяет промоделировать влияние процессов одноэлектронной перезарядки на рассеяние многозарядных ионов в кристалле, состоит в следующем: если в процессе движения иона сближение с какой-либо атомной цепочкой становится меньше чем $\rho_c(q)$, то заряд иона уменьшается на единицу, если же сближение с атомной цепочкой становится меньше чем $\rho_l(q)$, то заряд иона увеличи-

вается на единицу. При этом проверка значения прицельного параметра на выполнение того или иного условия происходит на шаге равном времени пролета между двумя соседними атомами в цепочке.

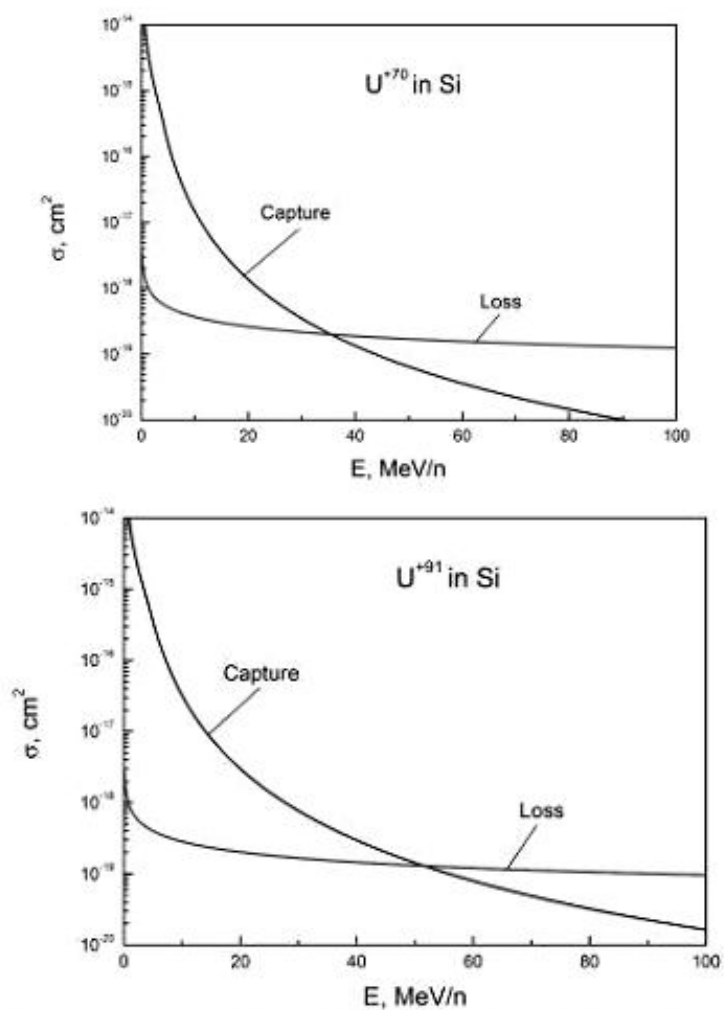


Рис.5. Зависимость от энергии ионов урана сечения захвата и потери электрона для двух различных зарядовых состояний.

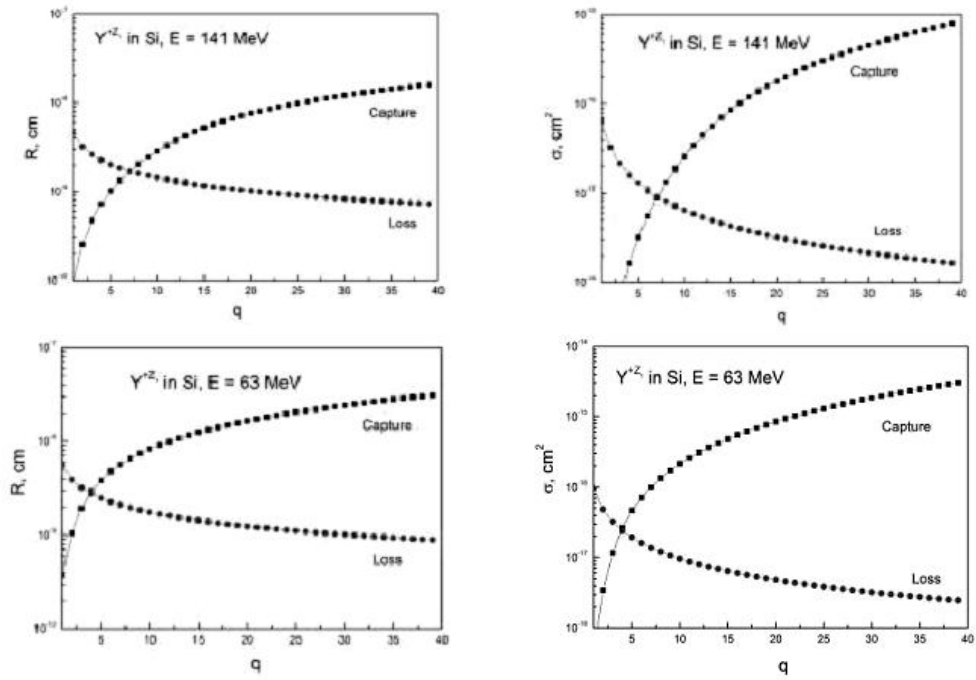


Рис.6. Зависимость от текущего зарядового состояния сечений и характерных прицельных параметров перезарядки для двух различных энергий ионов иттрия.



3. Рассеяние коллимированных пучков многозарядных ионов

Исследование зарядовых распределений коллимированных пучков многозарядных ионов высокой энергии показало, что при углах меньше критического в зарядовых распределениях присутствует так называемый «замороженный заряд», т.е. начальное зарядовое состояние. Причем доля его почти на порядок превышает вклад остальных зарядовых состояний. Увеличение угла влета до значений, превосходящих критический угол каналирования в несколько раз, приводит к смещению максимума в зарядовом распределении в область, соответствующую равновесному заряду при хаотическом движении. Такое поведение распределения по зарядовым состояниям при различных углах влета показано на рис. 7.

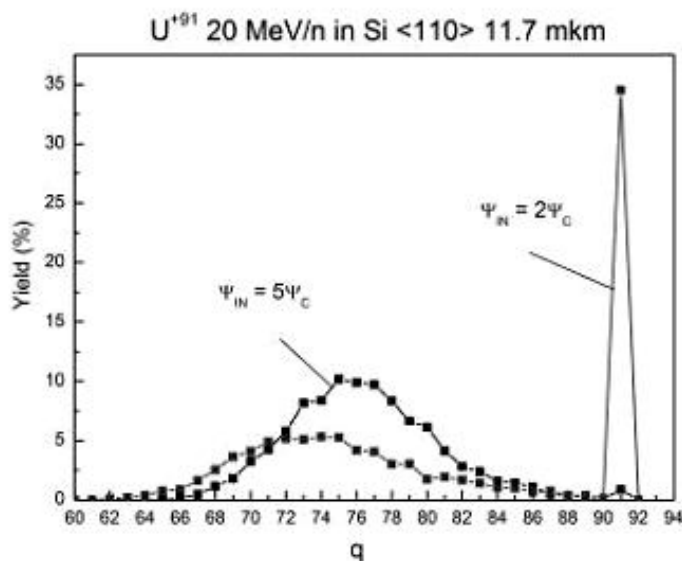


Рис. 7. Распределение по зарядовым состояниям ионов урана с энергией 20 МэВ/н после прохождения кристалла кремния при различных ориентациях вдоль осевого направления <110>

Угловые распределения коллимированного пучка ионов, прошедшего кристалл вдоль осевого направления, имеют интересную особенность. Во-первых, в силу сделанного выше замечания, влияние перезарядки на угловые распределения каналированного пучка незначительно. Во-вторых, пучок, падающий вдоль оси канала, на выходе имеет угловое распределение близкое к распределению Гаусса. Если же угол влета не равен нулю, то прошедшие частицы формируют за кристаллом кольцеобразные распределения, обусловленные эффектом радужного рассеяния ионов на отдельных атомных цепочках. На рис. 8 показаны рассчитанные угловые распределения многозарядных ионов урана, прошедших тонкий кристалл кремния вдоль осевого направления <110>. Полученные результаты позволяют построить статистическое распределение по углам отклонения ионов от первоначального направления и определить ориентационную зависимость среднеквадратичного угла рассеяния ионов от угла влета в кристалл относительно осевого направления. Результаты такого анализа приведены на рис. 9. Среднеквадратичный угол отклонения каналированных ионов от первоначального направления при углах влета близких к критическому к углу каналирования превышает среднеквадратичный угол рассеяния в аналогичной аморфной среде. При меньших углах влета многократное рассеяние подавлено. Этот результат находится в соответствии с полученными ранее данными для каналирования электронов и позитронов в работе [10].

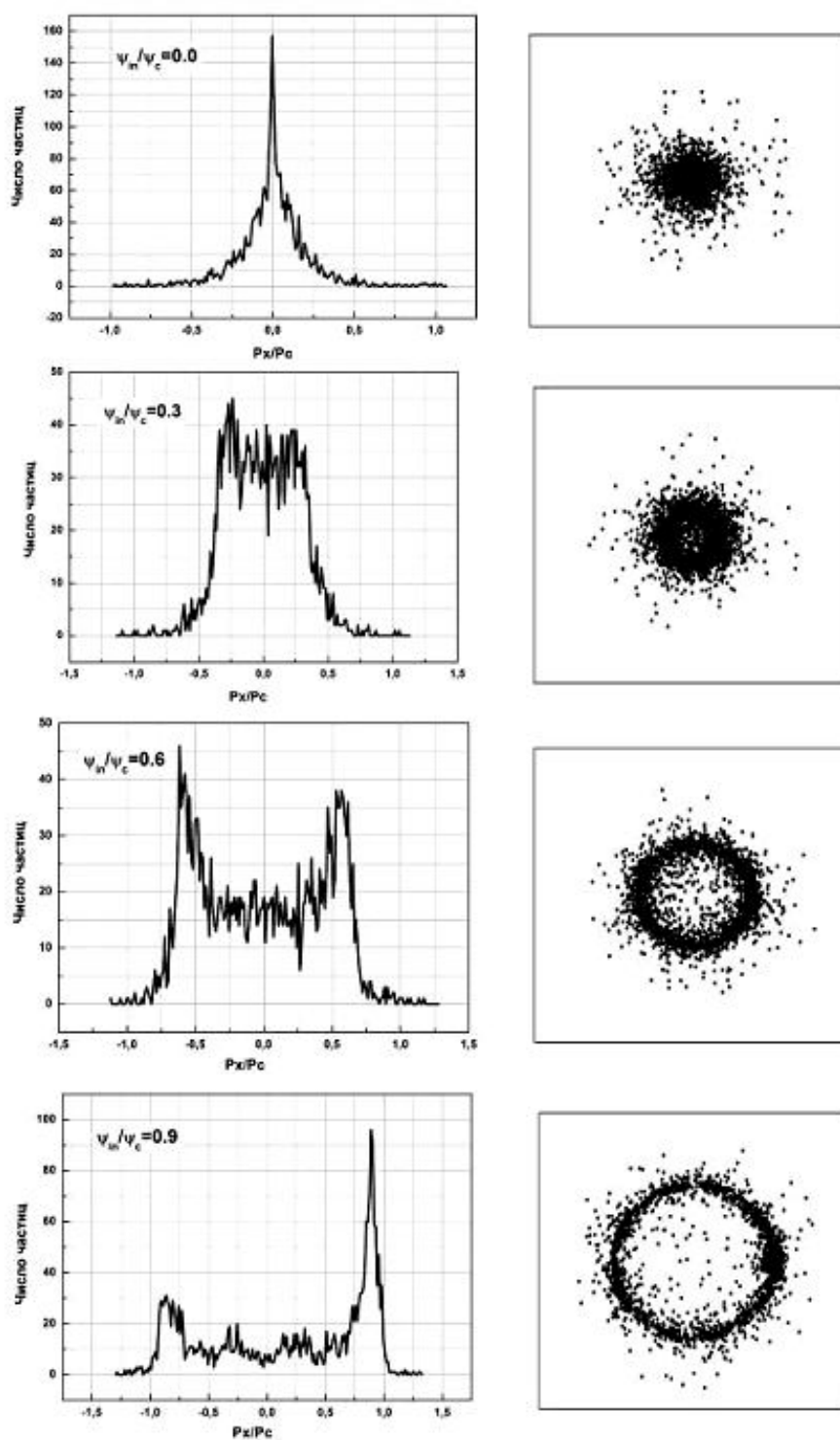


Рис. 8. Угловые распределения ионов U^{91} с энергией 20 МэВ/п, прошедших кристалл кремния толщиной 11.7 мкм вдоль осевого канала $\langle 110 \rangle$ при различных начальных углах алета ψ_{in} , выраженных в единицах критического угла каналирования ψ_c . Распределение моделировалось расчетом 2500 траекторий

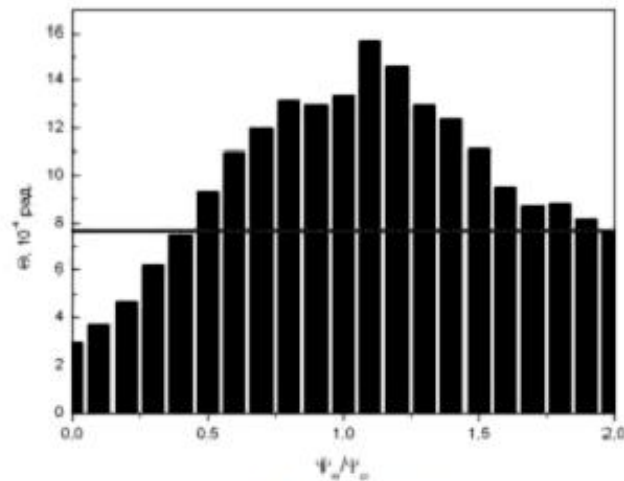


Рис. 9. Среднеквадратичное отклонение ионов U^{91} с энергией 20 МэВ/п, прошедших кристалл кремния толщиной 11.7 мкм вдоль осевого канала $\langle 110 \rangle$ при различных начальных углах влета.

Прямой линией показан угол многократного рассеяния в соответствующей аморфной среде.

Распределение моделировалось расчетом 2500 траекторий

4. Рассеяние квазиизотропных пучков многозарядных ионов

Недавно в работах [11-13] было сообщено об экспериментальном обнаружении нарушения правила обратимости при каналировании и блокировании многозарядных ионов. Согласно этому правилу, в частности, первоначально изотропное угловое распределение ионов должно сохранять изотропность и после прохождения ионов через кристалл. Авторы [11-13] направляли на разные кристаллы пучки многозарядных ионов различных энергий с квазиизотропным распределением по углам (аналог экспериментов по блокировке с точечным изотропным источником α -частиц) и наблюдали анизотропию выходного пучка. В одних случаях, вдоль кристаллографических плоскостей или осей наблюдается увеличение выхода в угловом распределении (поперечное «охлаждение»), в других случаях – уменьшение количества частиц в этих направлениях (поперечный «нагрев»). При низкой энергии наблюдается так называемая «слунка» в угловом распределении (нагрев), а при высокой имеет место пик (охлаждение), т.е. переход от охлаждения к нагреву происходит при уменьшении энергии пучка ионов. Очевидно, что объяснение этого явления следует искать в особенностях эффекта перезарядки каналированных ионов, а именно в зависимости вероятности обмена зарядом между ионом и атомами кристалла от прицельного параметра.

Результаты моделирования для квазиизотропного пучка ионов иттрия с различными энергиями показаны на Рис.10. Как видно из приведенных результатов, в соответствии с экспериментальными данными [12] при уменьшении энергии ионов со 141 МэВ до 63 МэВ происходит значительное уменьшение числа частиц, прошедших кристалл вдоль кристаллографического направления, т.е. наблюдается эффект «нагрева». При энергии 141 МэВ в число частиц прошедших вдоль оси несколько больше, чем при отличных от нуля углах вылета (эффект «охлаждения»). Физическую причину наблюдаемых явлений можно понять, если проанализировать распределение по зарядовым состояниям прошедшего кристалл пучка ионов (Рис.11). Средний заряд ионов иттрия при энергии 63 МэВ равен, примерно, $\bar{q} \approx 5$. Как видно из Рис.6 при этом $\rho_l(\bar{q}) \leq \rho_c(\bar{q})$. При энергии же 141 МэВ средний заряд $\bar{q} \approx 7$ и, как следует из того же рис. 6, наоборот $\rho_l(\bar{q}) \geq \rho_c(\bar{q})$. Это обстоятельство является решающим для понимания эффектов нагрева и охлаждения.

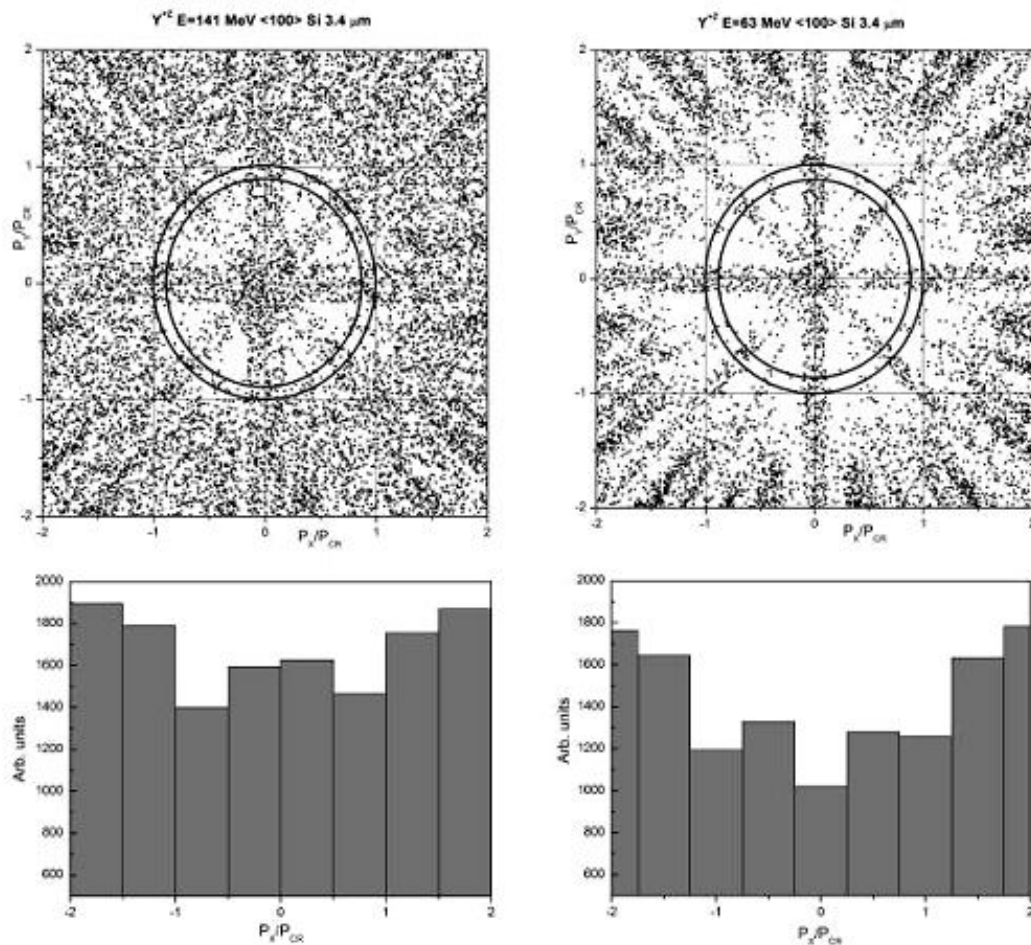


Рис. 10. Угловые распределения квазиизотропного пучка ионов иттрия, прошедшего кристалл кремния толщиной 3.4 мкм вдоль осевого канала $\langle 100 \rangle$ при различных начальных энергиях. Распределение моделировалось расчетом 15000 траекторий

Действительно, рассмотрим, например, ион с заданным зарядом и с заданной поперечной энергией. Его поперечное движение управляется цепочечным потенциалом, отнесенным к единичному заряду $u(\rho)$, который является убывающей функцией ρ . Если на расстоянии ρ произойдет изменение заряда (потеря или захват одного электрона), поперечная энергия иона изменяется на $+u(\rho)$ при потере электрона и на $-u(\rho)$ при захвате. Для качественного объяснения эффекта введем в рассмотрение средние радиусы захвата и потери ρ_c и ρ_l , соответственно. Когда достигается равновесие в зарядовом распределении ионов, то в среднем происходит одинаковое число потерь и захватов электронов. Рассмотрим ситуацию, в которой ион проходит через цикл, состоящий из равного числа n захватов и потерь электронов. В результате цикла процессы захвата и потери поперечная энергия иона изменится по абсолютной величине и станет равной $n[u(\rho_l) - u(\rho_c)]$. Таким образом, в соответствии с результатами

нашего моделирования, если $\rho_l > \rho_c$, то в этом случае $u(\rho_l) < u(\rho_c)$, и цикл приведет к уменьшению поперечной энергии, т.е. к охлаждению и, наоборот, если $\rho_l < \rho_c$, то $u(\rho_l) > u(\rho_c)$, что приведет к увеличению поперечной энергии, т.е. к нагреву. Эффективность нагрева или охлаждения будет высока, если, во-первых, величины ρ_c и ρ_l сильно отличаются друг от друга а, во-вторых, если велики сечения обмена зарядами, что справедливо в случае каналирования тяжелых ионов при средних скоростях.

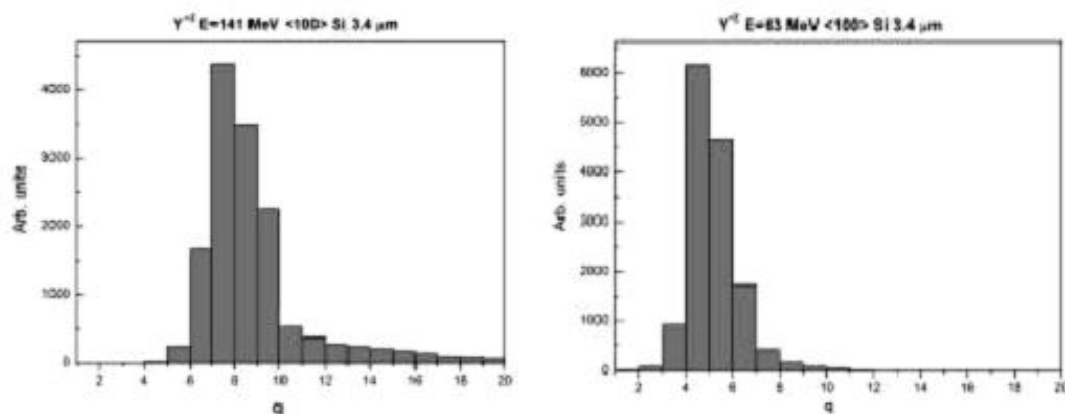


Рис. 11. Распределение по зарядовым состояниям квазиизотропного пучка ионов иттрия, прошедшего кристалл кремния толщиной 3.4 мкм вдоль осевого канала <100> при различных начальных энергиях. Распределение моделировалось расчетом 15000 траекторий

Заключение

Проведенное численное моделирование прохождения ускоренных многозарядных ионов через ориентированные кристаллы позволяет сделать следующие выводы:

- при углах влета в кристалл меньше критического в зарядовых распределениях коллимированных пучков присутствует «замороженный заряд», т.е. начальное зарядовое состояние. Причем доля его значительно превышает вклад остальных зарядовых состояний;
- увеличение угла влета до значений, превосходящих критический угол каналирования в несколько раз, приводит к смещению максимума в зарядовом распределении в область, соответствующую равновесному заряду при хаотическом движении;
- при ненулевых углах влета в кристалл прошедшие ионы формируют за кристаллом кольцеобразные распределения, обусловленные эффектом радужного рассеяния на отдельных атомных цепочках;
- среднеквадратичный угол отклонения каналированных ионов от первоначального направления при углах влета близких к критическому углу каналирования превышает среднеквадратичный угол рассеяния в аналогичной аморфной среде;
- предложенная ступенчатая модель одноэлектронной перезарядки адекватно описывает наблюдаемые особенности прохождения квазиизотропных пучков многозарядных ионов через кристаллы и позволяет объяснить эффекты «охлаждения» и «нагрева»;
- проявление эффектов охлаждения или нагрева квазиизотропных пучков тяжелых многозарядных ионов определяется зависимостью вероятностей захвата и потери электронов от прицельного параметра при взаимодействии ионов с атомными цепочками, что и изменяет характер их углового распределения.

Итак, мы видим, что процессы перезарядки существенно сказываются на динамике прохождения многозарядных ионов через кристаллы. Дальнейшее развитие теории ион-атомных столкновений в кристаллах позволит не только получить надежные данные о вероятностях перезарядки ионов в кристаллах, но и развить теорию каналирования многозарядных ионов. Исследования в этой области, несомненно, помогут найти ответы на многие вопросы современной электродинамики многозарядных ионов в кристаллах и дадут ключ к созданию новых технологий в экспериментальной и прикладной физике.

Литература

1. Cohen C., Dauvergne D. High energy ion channeling. Principles and typical applications. // Nucl. Instr. And Meth. in Phys. Res. – 2004. – V. B 225 – P. 40-71.
2. Bohr N. The penetration of atomic particles through matter. // Det. Kgl. Dan. Vid. Sel. Mat. Fys. Medd. – 1948. – V. XVIII. – P. 425-569.
3. Lindhard J. Influence of crystal lattice on motion of energetic charged particles. // Kgl. Dan. Vidensk. Selsk., Mat.-Fys. Medd. – 1965. – V. 34, #14. – 64 p.
4. Doyle P.A., Turner P.S. Relativistic Hartree-Fock X-ray and Electron Scattering Factors. // Acta Cryst. – 1968. – V. A24. – P. 390-397.
5. Betz H.D. Charge states and charge-changing cross sections of fast heavy ions penetrating through gaseous and solid media. // Rev. Mod. Phys. – 1972. – V. 44. – P. 465-539.
6. Shima K., Kuno N., Yamanouchi M. Systematic of equilibrium charge distributions of ions passing through a carbon foil over the ranges $Z=4-92$ and $E=0.02-6$ MeV/u. // Phys. Rev. – 1987. – V. A 40. – P. 3557 – 3570.
7. Shima K., Kuno N., Yamanouchi M., Tawara H. Equilibrium Charge Fractions of Ions of $Z = 4-92$ Emerging from a Carbon Foil. // Atomic Data and Nuclear Data Tables. – 1992 – V. 51. – C. 173-241.
8. Bohr N., Lindhard J. Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk.. -1954. V. – 28. № – 7.
9. Knudsen H., Haugen H.K., Hvelplund P. Single-electron-capture cross section for medium- and highly charged ions colliding with atoms. // Phys.Rev. – 1981. – V. A23. C. – 597-610.
10. А.И. Ахиезер, Н.Ф.Шульга. Излучение релятивистских частиц в монокристаллах. // Успехи физических наук. – 1982 – Т. 137. С – 561-604..
11. Assmann W. et al. Transversal cooling or heating of channeled ions by electron capture and loss. / W. Assmann, H. Huber, S.A. Karamian, F. Gruner, H.D. Mieskes, J.U. Andersen, M. Posselt, B. Schmidt // Phys. Rev. Lett. – 1999. – V. 83, #9. – P. 1759 – 1762.
12. Schubert M. et al. Cooling and heating of channeled ions and corresponding charge state distributions. / M. Schubert, F. Gruner, W. Assmann, F. Bell, A. Bergmaier, L. Goergens, O. Schmelmer, G. Dollinger, S. Karamian // Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. – 2003 – V. B 209. – P. 224-232.
13. Gruner F. Transverse cooling and heating in ion channeling. / F. Gruner, W. Assmann, F. Bell, M. Schubert, J.U. Andersen, S. Karamian, A. Bergmaier, G. Dollinger, L. Gorgens, W. Gunther, M. Toulemonde. // Phys. Rev. – 2003. – V. B 68. – P. 174104-1–174104-12.

SCATTERING OF THE MULTIPLY CHARGED IONS IN THE ORIENTED CRYSTALS

V.S. Malyshevsky, D.A. Trukhov

Southern Federal University, Department of Physics,
344090, Rostov-on-Don, Zorge Str., 5
e-mail: vmalysh@phys.rsu.ru

A numerical simulation of the accelerated multi-charged ions scattering in the axial channeling in crystals have been carried out. The angular distributions of collimated beams of ions after passing through the crystals along the axial direction are investigated. An orientation dependence of the average angle of multiple scattering of multi-charged ions by the atomic chains is established. The angle of multiple scattering of ions in the axial channeling is higher than angle of multiple scattering in the amorphous matter. The occurrence of cooling or heating effects and the detailed structure of the angular distribution depend on the impact parameter dependence of the probabilities for electron capture and loss.

Key words: multi-charged ions, channeling, multiple scattering, numerical simulation.