

СУРГУТСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ ХМАО

На правах рукописи

Сафин Наиль Владисович

**Моделирование траекторий быстрых
протонов и ядер в прямых и изогнутых кристаллах**

05.13.18 – Математическое моделирование, численные методы и
комплексы программ

Диссертация на соискание учёной степени кандидата физико-
математических наук

Сургут 2006

СУРГУТСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ ХМАО

На правах рукописи

Сафин Наиль Владисович

**Моделирование траекторий быстрых
протонов и ядер в прямых и изогнутых кристаллах**

05.13.18. – Математическое моделирование, численные методы и
комплексы программ

Диссертация на соискание учёной степени кандидата физико-
математических наук

Научный руководитель
доктор физико-математических наук, профессор
Кошечев Владимир Петрович

Сургут 2006

СОДЕРЖАНИЕ

Введение	4
1 глава Теория каналирования	14
1.1 Геометрия кристаллов	16
1.2 Характеристики алмазоподобных кристаллов	22
1.3 Потенциальная энергия взаимодействия быстрых ионов с атомами кристалла	23
1.4 Коэффициенты диффузии	27
1.5 Уравнение движения	31
1.5.1 Описание флуктуаций	32
1.5.2 Уравнение Фоккера-Планка	36
1.6 Потенциал переходной области ось-плоскость	38
1.7 Потери энергии	42
1.8 Модели деканалирования	43
2 глава Моделирование движения релятивистских заряженных частиц в каналах кристалла	45
2.1 Компьютерное моделирование процессов, связанных с каналированием	46
2.2 Модель движения заряженных частиц в каналах кристалла	48
2.3 Компьютерная реализация модели PST	51
2.3.1 Версии XV и SM	51
2.3.2 Обезразмеривание параметров движения	52
2.3.3 Описание программы	55
2.3.3.1 Модуль задания начальных условий и параметров движения	55
2.3.3.2 Решатель траекторий	56
2.3.3.3 Модуль расчёта потерь энергии	60

2.3.3.4	Реализация методов расчёта деканализирования	60
2.4	Алгоритм работы с программой	62
2.5	Достоверность результатов	66
3	глава Моделирование движения быстрых заряженных	
	частиц в прямых кристаллах	68
3.1	Исследование плоскостных колебаний	69
3.2	Исследование деканализирования релятивистских частиц	71
3.3	Движение отрицательно заряженных частиц	75
3.4	Исследование влияния переходной области ось-плоскость	77
4	глава Исследование влияния изгиба на траектории	
	заряженных частиц в каналах кристаллов	85
4.1	Влияние изгиба кристалла на траектории каналированных	
	частиц	85
4.1.1	Эффективный потенциал	86
4.1.2	Способы изгиба кристалла	89
4.1.3	Уравнение деформации	91
4.2	Экспериментальные данные	97
4.3	Компьютерное моделирование	98
4.4	Результаты моделирования и выводы	100
	Заключение	105
	Список литературы	107
	Приложение	114

ВВЕДЕНИЕ

В представленной работе рассматривается применение метода компьютерного моделирования для исследования ориентационных эффектов, возникающих при движении быстрых заряженных частиц через кристаллы. Это каналирование и связанные с ним явления, такие как, выход частиц из каналов (деканалирование), потери энергии и многократное рассеяние. Основное проявление эффекта каналирования состоит в том, что положительно заряженные частицы, движущиеся по направлениям, соответствующим каналам кристалла, могут проникать на бóльшую глубину, чем по другим направлениям, для отрицательных частиц, наоборот, пробеги по этим же направлениям наименьшие. Увеличение проникновения происходит потому, что при прохождении заданного расстояния по каналированной траектории теряется меньшая энергия, так как эта траектория лежит в области низкой электронной плотности. Также, в работе исследуется влияние изгиба и ориентации кристалла на движение через него частиц.

Исследование ориентационных свойств кристаллов началось в начале 20 века с экспериментов по дифракции рентгеновских лучей на кристаллической решетке, в ходе которых было доказано упорядоченное расположение атомов в кристалле. В 1912г. немецкий физик Й.Штарк (J.Stark) предсказал возможность каналирования, сделав предположение о влиянии упорядоченного расположения атомов кристалла на движение заряженных частиц, в частности протонного пучка и предлагал проверить это экспериментально. В 1960-х годах было проведено первое компьютерное моделирование [1], а затем и эксперименты по прохождению ионов с энергиями порядка МэВ через кристаллы. Во второй половине 1960-х годов была опубликована работа Й.Линдхарда [2], где разрабатывалась теория каналирования. На основе применения законов классической механики к описанию движения быстрых заряженных частиц в кристаллической решётке. В рамках теории Линдхарда

было обосновано применение диффузионной модели и непрерывного потенциала взаимодействия, а также определены условия каналирования.

В 1976г. Э.Н.Цыганов (Объединённый институт ядерных исследований, Дубна) в работе [3] предсказал возможность отклонения релятивистских заряженных частиц изогнутыми кристаллами, что было позже подтверждено экспериментально. В работе [3] предлагалось использовать электрическое поле изогнутого кристалла для управления пучками заряженных частиц. При этом предполагалось, что каналированные положительно заряженные частицы будут следовать изгибу кристалла до некоторого критического радиуса изгиба каналов ("радиус Цыганова"), который определяется максимальной напряжённостью усреднённого вдоль плоскостей электрического поля атомов кристалла и энергией каналированной частицы. Экспериментально была обнаружена также возможность фокусировки пучков заряженных частиц.

В настоящее время подобный способ отклонения заряженных частиц изогнутыми кристаллами широко применяется для формирования и транспортировки пучков заряженных частиц и вывода их из ускорителей. Достигнута эффективность отклонения более 50% [4]. Применение изогнутых кристаллов для таких целей имеет ряд преимуществ, например, меньшие физические размеры отклоняющего устройства по сравнению со способом отклонения заряженных частиц внешними магнитными полями, меньший радиационный фон, отсутствие затрат энергии.

В ходе исследований каналирования в изогнутых кристаллах были обнаружены такие эффекты, как объёмный захват [5] и объёмное отражение [6], интересные для кристаллооптики заряженных пучков. Среди современных работ по этим эффектам можно назвать работу [7], где описывается эксперимент по отклонению протонного пучка с энергией 70 ГэВ в (111)-плоскостных каналах равномерного изогнутого кристалла кремния. В проведённом эксперименте наблюдалось объёмное отражение протонов. В работе [8] приводятся физические основы и рассматриваются режимы работы применяемой в ИФВЭ схемы вывода протонов из ускорителя с использованием

коротких кристаллов кремния, а также обсуждаются способы изгибов кристаллов. В обзоре [9] сообщается об экспериментах, проведённых в ЦЕРН с целью изучения каналирования в изогнутых кристаллах. Исследовалось влияние на эффективность отклонения энергии каналированных частиц и различных способов изгиба кристалла. В работе [10] рассматриваются особенности движения каналированных частиц и даётся обзор результатов исследования каналирования частиц в изогнутом кристалле. В обзоре [11] указываются результаты исследований каналирования в изогнутых кристаллах, а также области применения изогнутых кристаллов.

Кроме управления пучками частиц изогнутым кристаллом, явление каналирования можно применять и в других целях. Так, изогнутый кристалл можно использовать в физических экспериментах для измерения магнитного момента короткоживущих частиц по прецессии их спина. Теоретические основы поворота спина в электрическом поле плоскостного канала изогнутого канала описаны в работе [12]. Данная возможность была экспериментально подтверждена. При прохождении легких заряженных частиц через кристаллы можно получить жёсткое монохроматическое излучение, т.е. возможно создание источников излучения в гамма- и рентгеновском диапазонах [13]. С помощью пропускания тяжёлых заряженных частиц можно анализировать совершенство кристаллической решётки, определять наличие дефектов и местоположения атомов примесей. Во всех этих направлениях получены интересные результаты, что поддерживает большой интерес к эффекту каналирования и связанным с ним явлениям. Косвенным подтверждением актуальности подобных исследований можно назвать тот факт, что ежегодно проводятся научные конференции, выходит множество публикаций по взаимодействию частиц с кристаллами.

Возможность применения эффекта каналирования для анализа структуры кристалла связана с явлениями плоскостных колебаний быстрых заряженных частиц в кристаллах и резерфордовского обратного рассеяния, которые являются проявлениями процесса установления статистически равновес-

ного пространственного распределения каналированных частиц. Наличие примесей или дефектов в кристалле в зависимости от их расположения приводит к изменению интенсивности обратного рассеяния. Таким образом, анализируя спектры обратного рассеяния можно точно установить местоположение дефекта или атома примеси. Исследованиям в данной области посвящены работы [14-16], и других авторов. Например, в работе [17] исследуется спектр обратного рассеяния для ионов гелия с энергией 1.9 МэВ в железе, в [14] приводятся спектры обратного рассеяния ионов гелия с энергией несколько МэВ в кристалле кремния с примесями висмута, а в работе [16] анализируются спектры для кристалла кремния с примесью мышьяка с помощью метода "неравновесного каналирования". В работе [15] описано применение компьютерной программы, основанную на моделировании в фазовом пространстве поперечных координат и импульсов методом Монте-Карло для изучения плоскостных колебаний при плоскостном каналировании; процесс установления статистического равновесия показан на графиках эволюции распределения частиц в фазовом пространстве.

Также проводятся исследования каналирования отрицательно заряженных частиц. Например, в работе [18] представлены результаты экспериментального исследования каналирования антипротонов с энергией 1.4 МэВ в осевом канале $\langle 100 \rangle$ кристалла кремния толщиной 0.5 мкм.

В работе (см. например, [19]) экспериментально было обнаружено, так называемое, резонансное деканалирование ионов при переходе из осевых в плоскостные каналы, состоящее в раскачке поперечных колебаний каналированных ионов при совпадении периода собственных колебаний ионов в каналах с временем пролета между соседними атомными цепочками.

В работе [20] сообщалось об обнаружении нового эффекта, возникающего при каналировании первоначально изотропного пучка тяжёлых ионов в кристалле кремния. В эксперименте наблюдалось изменение интенсивности в угловых распределениях ионов, прошедших через кристалл. Наблюдалось либо уменьшение (охлаждение), либо увеличение (нагрев) поперечной энер-

гии, при чём, указанные эффекты зависят от сорта и энергии каналированных ионов, а также от толщины кристалла. Предполагается, что такое перераспределение связано с потерями энергии на электронах и захватом частиц в каналы. Указывается, что данное явление не объясняется классической теорией каналирования, и не было воспроизведено с помощью компьютерного моделирования.

Преимущественное развитие теории каналирования проходило в рамках метода кинетических уравнений движения, описывающих эволюцию плотности потока каналированных частиц как в фазовом пространстве поперечных координат и скоростей, так и в пространстве поперечных энергий. Кинетическое описание эффекта каналирования быстрых заряженных частиц в кристаллах было впервые предложено Й. Линдхардом [2] с помощью уравнения движения диффузионного типа. Ю.В.Мартыненко в работе [21] предложил использовать кинетическое уравнение Фоккера-Планка в пространстве поперечных энергий для описания эффекта каналирования, а в работе [22] было впервые предложено применение кинетического уравнения Фоккера-Планка в фазовом пространстве поперечных координат и скоростей. В этой же работе были рассмотрены коэффициенты диффузии каналированных частиц на ядрах и электронах кристалла. В работе [23] указывалось, что решение кинетического уравнения Фоккера-Планка в пространстве поперечных координат и импульсов представляет собой весьма сложную в математическом отношении задачу, а в качестве одного из возможных методов её решения предлагалось использовать метод численного моделирования траекторий каналированных частиц. В [24] представлены точное решение уравнения Фоккера-Планка для гармонического потенциала плоскостного канала и приближённое решение для ангармонического потенциала плоскостного канала.

Таким образом, одной из актуальных задач теории был поиск решения уравнения Фоккера-Планка в случае, когда:

1. Непрерывный потенциал плоскостного канала учитывает тепловые колебания атомов кристалла, а также местоположения атомов в элементар-

ной кристаллической ячейке, и раскладывается в тригонометрический ряд Фурье, а компонента Фурье потенциала изолированного атома берутся в приближениях Мольер или Дойля-Тёрнера.

2. Электронный коэффициент диффузии вычисляется в приближении локальной электронной плотности, а ядерный в приближении Китагавы-Оцуки. Электронная плотность, входящая в формулу для электронного коэффициента диффузии вычисляется в приближениях Мольер или Дойля-Тёрнера.

Одной из актуальных задач физики эффекта каналирования релятивистских частиц, не получивших объяснения вплоть до настоящего времени был эффект уменьшения скорости деканалирования положительно заряженных релятивистских протонов из плоскостных и осевых каналов кристаллов кремния и германия, обнаруженный в эксперименте [25].

Одним из способов исследования явлений, связанных с прохождением заряженных частиц через кристаллы является компьютерное моделирование, получившее в настоящее время большие возможности из-за развития компьютерной техники. Компьютерное моделирование траекторий каналированных частиц является в настоящее время единственным методом, позволяющим планировать экспериментальные исследования на количественном уровне, и в тоже время является наиболее гибким методом исследования. Разрешение по поперечной координате и скорости, число и длины отрезков прослеживаемых траекторий частиц и другие параметры могут быть легко оптимизированы в зависимости от цели компьютерного эксперимента. Кроме того, компьютерное моделирование значительно дешевле физических экспериментов.

В данной работе предлагается программа компьютерного моделирования движения релятивистских заряженных частиц в алмазоподобных кристаллах. Математическая модель программы основывается на численном решении уравнения Фоккера-Планка в фазовом пространстве поперечных координат и скоростей. С помощью предлагаемой компьютерной программы

проводятся численные эксперименты по изучению плоскостных колебаний ионов гелия в кристалле кремния, деканализирования релятивистских протонов и влияния изгиба кристалла кремния на движение через него протонов. Полученные результаты хорошо согласуются с экспериментальными данными.

Цели работы:

1. Разработка компьютерной программы для исследования движения каналированных ионов в каналах алмазоподобных кристаллов, учитывающую изгиб кристалла, многократное рассеяние, начальную расходимость пучка частиц, различные аппроксимации потенциала отдельного атома.
2. Изучение с помощью компьютерного моделирования динамики потока быстрых частиц (протонов, положительных ионов) в режиме плоскостного каналирования в алмазоподобных кристаллах.
3. Исследование влияния изгиба кристалла на свойства потока каналированных частиц.

Метод исследования – компьютерное моделирование. Компьютерная программа моделирования траекторий, основанная на численном решении уравнения движения частиц в каналах кристаллов с учётом многократного рассеяния. Основу математической модели движения каналированных частиц составляет метод численного решения уравнения Фоккера-Планка в фазовом пространстве поперечных координат и скоростей, которое решается методом малого шума на небольших отрезках траектории. В качестве численного метода решения системы дифференциальных уравнений применяется метод Рунге-Кутты 4 порядка точности. Для учёта обратного влияния многократного рассеяния на траектории каналированных частиц применяется метод Монте-Карло. В рамках созданной компьютерной программы возможно проводить расчёт по трём моделям: без многократного рассеяния (версия XV), с учётом многократного рассеяния по моделям PST (предлагаемый способ описания многократного рассеяния) и SM ("стандартная модель" - реализуется

способ описания многократного рассеяния, подобный используемым в настоящее время в существующих компьютерных программах).

Обоснованность и достоверность полученных результатов

Обоснованность полученных результатов основана на том, что в качестве исходной посылки были выбраны уравнения (уравнения Фоккера-Планка и Ньютона), описывающие движение заряженных частиц в кулоновском потенциале электронов и ядер атомов кристалла. Флуктуации потенциала и корреляционные функции флуктуаций потенциала были определены в рамках общепринятой теории. Решения уравнений движения искались с помощью метода малого шума [26] и метода многих масштабов [27].

Достоверность результатов связана с хорошим согласием полученных в результате моделирования результатов с экспериментальными данными [4], [14] и [25].

Научная и практическая значимость работы

Описанная в работе программа моделирования траекторий каналированных ионов может быть применена для теоретических оценок и предсказания новых экспериментальных результатов. Представленный метод исследования позволяет надёжно интерпретировать эксперимент, а также проводить планирование и прогнозирование новых экспериментов по взаимодействию релятивистских частиц с кристаллами.

Научная новизна и результаты, вынесенные на защиту:

1. Предложен и реализован метод численного решения уравнения Фоккера-Планка в фазовом пространстве поперечных координат и скоростей с помощью компьютерного моделирования траекторий каналированных частиц.
2. Предложен комплекс алгоритмов и программа PST (the Phase Space of Transversal coordinates and velocities) моделирования траекторий, представляющая собой алгоритмическое наполнение модели движения заряженных частиц в плоскостных каналах алмазоподобных кристаллов.

3. Результаты исследования движения заряженных частиц в кристаллах, полученные с помощью программы PST.

4. Обнаруженный в компьютерном эксперименте эффект уменьшения скорости деканализирования релятивистских положительно заряженных частиц в плоскостных каналах кристаллов кремния и германия.

Апробация работы

Основные результаты работы докладывались на следующих научных конференциях:

- 34-36 Международные конференции по физике взаимодействия заряженных частиц с кристаллами (Москва, МГУ, 2004-2006г.)

- 17 Международной конференции "взаимодействие ионов с поверхностью" (ВИП-2005) (Звенигород, 2005г.)

- Sixth International Symposium on Swift Heavy Ions in Matter (Германия, 2005г.)

- 4-6 Открытых окружных конференциях молодых учёных "наука и инновации XXI века" (Сургут, 2003-2005г.)

Количество работ по диссертации - 19.

В работах [45,46] рассматривается взаимодействие многозарядных ионов с атомами кристалла и строится потенциальная энергия такого взаимодействия в приближении экранированного кулоновского потенциала. Показано, что вид потенциальной энергии зависит как от заряда ядра иона, так и от заряда самого иона. В [47-49] приводится математическая модель компьютерной программы моделирования траекторий PST. Работы [50-53] посвящены исследованию влияния потенциала переходной области ось-плоскость на движение каналированных частиц, в частности в [50,51] приводится вывод потенциала переходной области, исходя из решения уравнения движения каналированных частиц методом многих масштабов, а также производится компьютерное моделирование траекторий быстрых заряженных частиц в этом случае с целью обнаружения эффектов резонансного нагрева и охлаждения. В [52,53] учитывается влияние переходной области на выход ионов

гелия в связи с исследованиями плоскостных колебаний. В [54-56] на основе ланжевеновского подхода к теории каналирования [29] предлагается новый метод расчёта средней скорости потерь энергии каналированных частиц на электронах кристалла, а также представлены результаты расчётов спектров потерь энергии. Исследованию эффекта уменьшения скорости деканалирования релятивистских протонов посвящена работа [58]. В [59-61] производится моделирование траекторий протонов в изогнутых кристаллах. Результаты моделирования, полученные с помощью разработанной программы PST, также опубликованы в [62,63], где производится моделирование траекторий каналированных релятивистских электронов с целью расчёта спектральной интенсивности излучения.

ГЛАВА 1. ТЕОРИЯ КАНАЛИРОВАНИЯ

Благодаря особенностям строения кристаллов возможно устойчивое движение быстрых заряженных частиц между параллельными рядами атомов, образующих кристаллическую решётку (рис. 1.1). При этом пространство между рядами атомов называют "каналом", движущиеся в канале быстрые заряженные частицы – "канализованными" частицами, а сам процесс – явлением "канализования". Различают осевое канализование, когда частица движется между параллельными рядами атомов, и плоскостное – при движении частицы между атомными плоскостями, которые в свою очередь образованы из атомных рядов или цепочек.

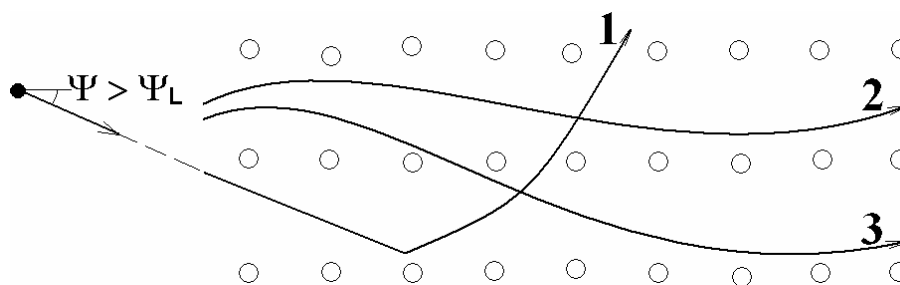


Рис. 1.1 Схема движения быстрых заряженных частиц в каналах кристалла. Траектория "1" характерна для неканализованной частицы – она движется под большим углом относительно цепочки атомов и рассеивается; траектория "2" – канализованная частица; траектория "3" – переход частицы из одного канала в другой.

В 1969 году была опубликована работа Й.Линдхарда [2], в которой были представлены основы теории канализования. Эту работу можно назвать фундаментальной в теории канализования, т.к. во-первых, представленные положения теории нашли своё подтверждение в экспериментах, а также в других теоретических моделях, во-вторых, были предложены некоторые предположения, основы и критерии канализования, которые используются по сей день. Для описания движения тяжёлых канализованных частиц Линдхард использовал законы классической механики, а для описания взаимодействия канализованной частицы с атомами кристалла предложил диффузионную модель и малоугловое приближение, согласно которому, при малом угле влёта заряженной частицы по отношению к атомной цепочке последователь-

ные столкновения частицы с атомами скоррелированы между собой и надо рассматривать взаимодействие со всей атомной цепочкой, т.е. частица рассеивается на малый угол при взаимодействии с одним атомом и сразу же попадет под действие следующего атома в цепочке, и, т.к. силы взаимодействия с этими атомами направлены в одну и ту же сторону, то происходит сравнительно плавный поворот импульса частицы вследствие взаимодействий с большим числом атомов цепочки. Также Линдхард предложил использовать вместо потенциалов отдельных атомов усреднённый непрерывный потенциал. В теории каналирования Линдхарда было определено главное условие каналирования частиц – критический угол каналирования Ψ_L (см. рис. 1.1), который зависит как от свойств кристалла, так и от энергии и заряда частицы.

Кроме взаимодействия с ядрами атомов кристалла необходимо учитывать и влияние атомных электронов. Для описания взаимодействия быстрой заряженной частицы с атомами кристалла и атомными электронами применяют потенциал взаимодействия. Но, т.к. описание реальных условий практически невозможно из-за случайного характера движения атомов и электронов, для моделирования используют усреднения флуктуаций атомов и электронов и применяют модельные приближения потенциалов. В ходе движения каналированная частица взаимодействует с атомами и их электронами из-за чего возможно рассеяние частицы на большой угол и выход её из канала (деканалирование). Для описания рассеяния частиц используют коэффициенты диффузии: электронный для описания рассеяния на электронах и ядерный. При любом взаимодействии каналированная частица теряет свою энергию (ионизационные потери энергии, излучение). Ионизационные потери энергии связаны с ионизацией и возбуждением атомов кристалла и обусловлены прежде всего взаимодействием движущейся быстрой заряженной частицы с электронами. Потери энергии для каналированной положительно заряженной частицы меньше чем для неканалированной, вследствие того, что траектория каналированной частицы лежит в области низкой электронной плотности.

1.1. Геометрия кристаллов

Кристаллы отличаются от аморфных веществ упорядоченным расположением частиц в узлах кристаллической решетки, состоящей из одинаковых элементарных ячеек. Длину элементарной ячейки вдоль какого-нибудь направления называют постоянной решётки. В свою очередь, элементарная ячейка составляется из одной или нескольких частиц, которые называют базисом. При выборе элементарной ячейки стремятся к наиболее простой форме, содержащей наибольшее количество прямых углов, и к минимальности её объёма.

Направления в кристаллической решетке задают координатами их направляющего вектора в базисных векторах $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$ (рис. 1.2), обычно их заключают в квадратные скобки. При этом знак минуса в случае отрицательности координаты изображают над числом. Наиболее важные направления задаются, как правило, целыми числами. Такие направления обычно параллельны пространственным диагоналям и диагоналям оснований куба (для кубической кристаллической решетки). Некоторые направления в силу симметрии решетки физически равноценны, например $[110]$, $[101]$, $[011]$ и $[\bar{1}10]$. Для описания такого семейства направлений используют треугольные скобки $\langle 110 \rangle$ [28].

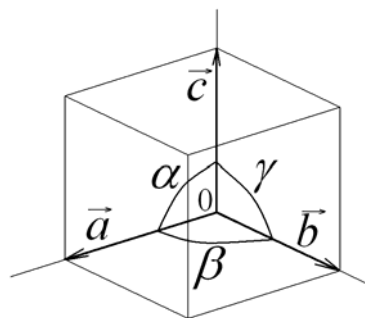


Рис. 1.2 Кристаллографические оси $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$.

Для полного описания структуры кристалла достаточно знать базис и пространственную решётку, получаемую путём параллельных переносов одной точки на все векторы трансляций $\vec{T} = n_1\vec{a} + n_2\vec{b} + n_3\vec{c}$, где n_1, n_2, n_3 — целые числа, описывающие одну и ту же точку базиса, но в разных элемен-

тарных ячейках. Пространственную решётку характеризуют базисными векторами $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$, задав их длины и углы между ними (рис. 1.2). Базис принято задавать, описав положения всех атомов в одной ячейке набором радиус-векторов $\vec{r}_i = x_i \vec{a} + y_i \vec{b} + z_i \vec{c}$, где числа x_i, y_i, z_i задают положения атомов в долях векторов $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$. В физике твёрдого тела при описании явлений дифракции и распространения волн и частиц в кристаллах применяются понятия обратной решётки и обратного пространства (пространства Фурье). Векторы прямой и обратной решёток связаны следующими соотношениями $\vec{A} = 2\pi \cdot [\vec{b} \times \vec{c}] / V$, $\vec{B} = 2\pi \cdot [\vec{c} \times \vec{a}] / V$, $\vec{C} = 2\pi \cdot [\vec{a} \times \vec{b}] / V$, где $V = (\vec{a} \times [\vec{b} \times \vec{c}])$ - объём элементарной ячейки. Векторы обратной решётки имеют размерность, обратную размерности векторов прямой решётки. Вектор трансляции узлов обратной решётки (или "вектор обратной решётки") в пространстве Фурье записывается как $\vec{g} = h\vec{A} + k\vec{B} + l\vec{C}$, где h, k, l - целые числа.

Всё многообразие кристаллов может быть описано с помощью 14 типов кристаллических решёток (решёток Браве), различающихся соотношениями между величинами базисных векторов $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$ и углов между ними.

В кристалле большое значение имеют особые кристаллографические плоскости, проходящие через узлы кристаллической решетки. Именно кристаллографические плоскости, на которых расположено большое количество узлов кристаллической решетки, важны как для предсказания огранки кристалла, так и при рассмотрении движения частиц в нем. Кристаллографические плоскости принято описывать индексами Миллера - набором трех целых чисел, заключенных в круглые скобки ($h\ k\ l$). Знак минус отрицательного индекса принято ставить над ним. Геометрический смысл индексов Миллера сводится к угловым коэффициентам в "уравнении плоскости в отрезках". Индексы Миллера определяются следующим образом: находятся точки, в которых описываемая плоскость пересекает основные координатные оси; координаты найденных точек записываются в единицах постоянной решетки; находятся обратные значения полученных чисел, приведённые к их наимень-

шему целому, полученные значения и есть индексы Миллера. Для кубической решетки существуют три основных типа кристаллографических плоскостей: (100), (110) и (111) (рис. 1.3).

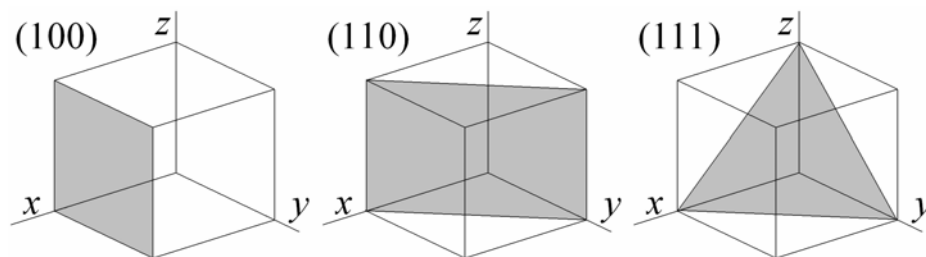


Рис. 1.3 Основные типы кристаллографических плоскостей кубических кристаллов.

Эти плоскости, из-за особого расположения атомов кристалла, будут различаться по электрическим свойствам: различия по высоте и форме потенциальной энергии ("потенциала") взаимодействия с налетающими заряженными частицами. Для описания движения в каждом из плоскостных каналов необходимо знать координаты атомов кристалла в соответствующей системе координат.

В работе рассматриваются алмазоподобные кристаллы, к которым относятся: алмаз, кремний и германий. Алмазоподобная решетка может быть представлена как решетка ГЦК (гранецентрированная кубическая) с атомами по узлам и смещенными относительно них на $\frac{1}{4}$ пространственной диагонали. Базисом такой ГЦК решетки Браве будут два атома с координатами $(0; 0; 0)$ и $(\frac{1}{4}; \frac{1}{4}; \frac{1}{4})$. Однако в качестве элементарной ячейки алмаза удобнее выбирать куб с базисом из 8 атомов (рис. 1.4).

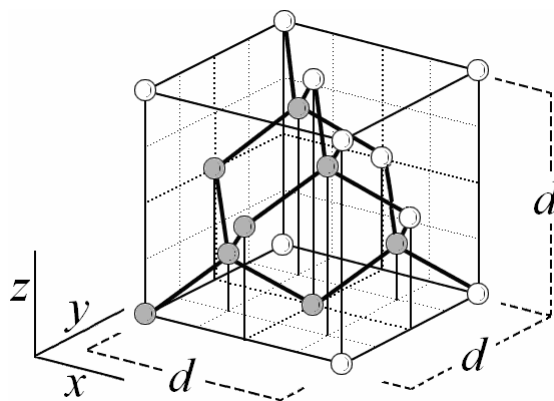


Рис. 1.4 Элементарная кристаллическая ячейка алмазоподобного кристалла.

Можно заметить, что каждый атом окружен четырьмя ближайшими соседями на расстоянии $\frac{1}{4}$ длины пространственной диагонали, расположенными относительно него как углы правильного тетраэдра относительно его центра, с ними он соединен ковалентными связями, образующими равные углы друг с другом. Координаты восьми базисных атомов для основных плоскостных направлений алмазоподобных кристаллов приведены в таблице 1.1:

Таблица 1.1

	j	1	2	3	4	5	6	7	8
(100)	X_j	0	0	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{4}$	$\frac{1}{4}$	$\frac{3}{4}$	$\frac{3}{4}$
	Y_j	0	$\frac{1}{2}$	0	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{4}$	$\frac{3}{4}$	$\frac{1}{4}$	$\frac{3}{4}$
	Z_j	0	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	0	$\frac{1}{4}$	$\frac{3}{4}$	$\frac{3}{4}$	$\frac{1}{4}$
(110)	X_j	0	$\frac{\sqrt{2}}{4}$	$\frac{\sqrt{2}}{4}$	$\frac{\sqrt{2}}{2}$	$\frac{\sqrt{2}}{4}$	$\frac{\sqrt{2}}{2}$	$\frac{\sqrt{2}}{2}$	$3 \cdot \frac{\sqrt{2}}{4}$
	Y_j	0	$\frac{\sqrt{2}}{4}$	$-\frac{\sqrt{2}}{4}$	0	0	$\frac{\sqrt{2}}{4}$	$-\frac{\sqrt{2}}{4}$	0
	Z_j	0	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	0	$\frac{1}{4}$	$\frac{3}{4}$	$\frac{3}{4}$	$\frac{1}{4}$
(111)	X_j	0	$\frac{1}{\sqrt{3}}$	$\frac{1}{\sqrt{3}}$	$\frac{1}{\sqrt{3}}$	$\frac{3}{4\sqrt{3}}$	$\frac{7}{4\sqrt{3}}$	$\frac{7}{4\sqrt{3}}$	$\frac{7}{4\sqrt{3}}$
	Y_j	0	$\frac{\sqrt{2}}{4}$	$-\frac{\sqrt{2}}{4}$	0	0	$\frac{\sqrt{2}}{4}$	$-\frac{\sqrt{2}}{4}$	0
	Z_j	0	$\frac{\sqrt{2}}{4\sqrt{3}}$	$\frac{\sqrt{2}}{4\sqrt{3}}$	$-\frac{1}{\sqrt{6}}$	0	$\frac{\sqrt{2}}{4\sqrt{3}}$	$\frac{\sqrt{2}}{4\sqrt{3}}$	$-\frac{\sqrt{2}}{2\sqrt{3}}$

Здесь координаты атомов приведены в единицах постоянной решётки d [24]. Удобнее пользоваться координатами атомов, вычисленными в единицах a_x, a_y, a_z – периодичности расположения атомов кристалла по направлениям осей OX, OY, OZ , в системах координат, связанных с заданным плоскостным направлением (рис. 1.5, таблица 1.2).

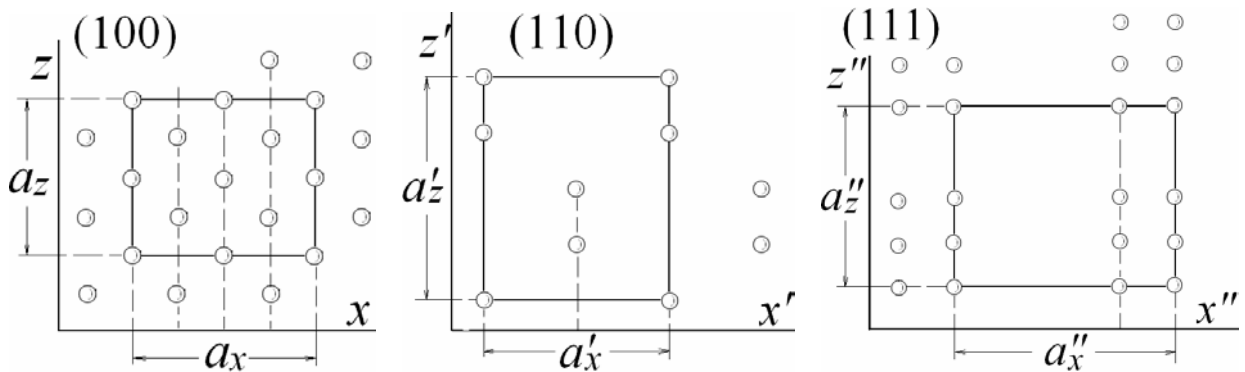
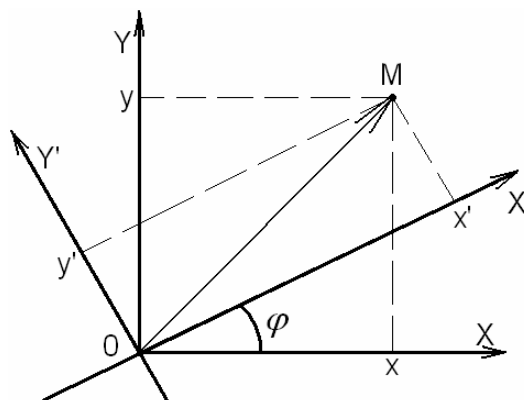


Рис. 1.5 Схемы расположения атомов алмазоподобного кристалла в плоскостных направлениях (100), (110) и (111). Оси z, z', z'' соответствуют продольному направлению движения каналированных частиц, оси x, x', x'' – поперечному направлению.

Таблица 1.2

	j	a_i	1	2	3	4	5	6	7	8
(100)	X_j	d	0	0	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{4}$	$\frac{1}{4}$	$\frac{3}{4}$	$\frac{3}{4}$
	Y_j	d	0	$\frac{1}{2}$	0	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{4}$	$\frac{3}{4}$	$\frac{1}{4}$	$\frac{3}{4}$
	Z_j	d	0	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	0	$\frac{1}{4}$	$\frac{3}{4}$	$\frac{3}{4}$	$\frac{1}{4}$
(110)	X_j	$d/\sqrt{2}$	0	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	1	$\frac{1}{2}$	1	1	$\frac{3}{2}$
	Y_j	$d/\sqrt{2}$	0	$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	0	0	$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	0
	Z_j	d	0	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	0	$\frac{1}{4}$	$\frac{3}{4}$	$\frac{3}{4}$	$\frac{1}{4}$
(111)	X_j	$d/\sqrt{3}$	0	1	1	1	$\frac{3}{4}$	$\frac{7}{4}$	$\frac{7}{4}$	$\frac{7}{4}$
	Y_j	$d/\sqrt{2}$	0	$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	0	0	$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	0
	Z_j	$d/\sqrt{3/2}$	0	$\frac{1}{4}$	$\frac{1}{4}$	$-\frac{1}{2}$	0	$\frac{1}{4}$	$\frac{1}{4}$	$-\frac{1}{2}$

Рассмотрим схему пересчёта координат при повороте системы координат на угол φ (рис. 1.6). Возьмём произвольную точку M с координатами в “старой” системе (x, y) . В “новой” (повёрнутой) системе координат соответствующие координаты будут (x', y') .

Рис. 1.6 Поворот системы координат на угол φ

Рассмотрим вектор OM , проведённый из начала координат к точке M . Вектор OM можно представить как сумму двух перпендикулярных векторов для каждой системы координат.

$$\left. \begin{aligned} \overrightarrow{OM} &= x \cdot \vec{i} + y \cdot \vec{j} \\ \overrightarrow{OM} &= x' \cdot \vec{i}' + y' \cdot \vec{j}' \end{aligned} \right\} \Rightarrow x \cdot \vec{i} + y \cdot \vec{j} = x' \cdot \vec{i}' + y' \cdot \vec{j}'$$

Здесь \vec{i}, \vec{j} - единичные направляющие вектора в системе XY , \vec{i}', \vec{j}' - единичные направляющие вектора в системе $X'Y'$, x, y, x', y' - соответствующие координаты точки M .

Таким образом, мы получили формулы для пересчёта координат при повороте:

$$x' = x \cdot \vec{i} \cdot \vec{i}' + y \cdot \vec{j} \cdot \vec{i}' = x \cdot \cos(\varphi) + y \cdot \cos(90^\circ - \varphi) = x \cdot \cos(\varphi) + y \cdot \sin(\varphi)$$

$$y' = x \cdot \vec{i} \cdot \vec{j}' + y \cdot \vec{j} \cdot \vec{j}' = x \cdot \cos(90^\circ + \varphi) + y \cdot \cos(\varphi) = -x \cdot \sin(\varphi) + y \cdot \cos(\varphi)$$

Для пересчёта координат, соответствующих плоскости (100) в координаты плоскости (110) надо повернуть систему координат вокруг оси Z (в плоскости XY) на угол $\varphi = 45^\circ$ (рис. 1.7).

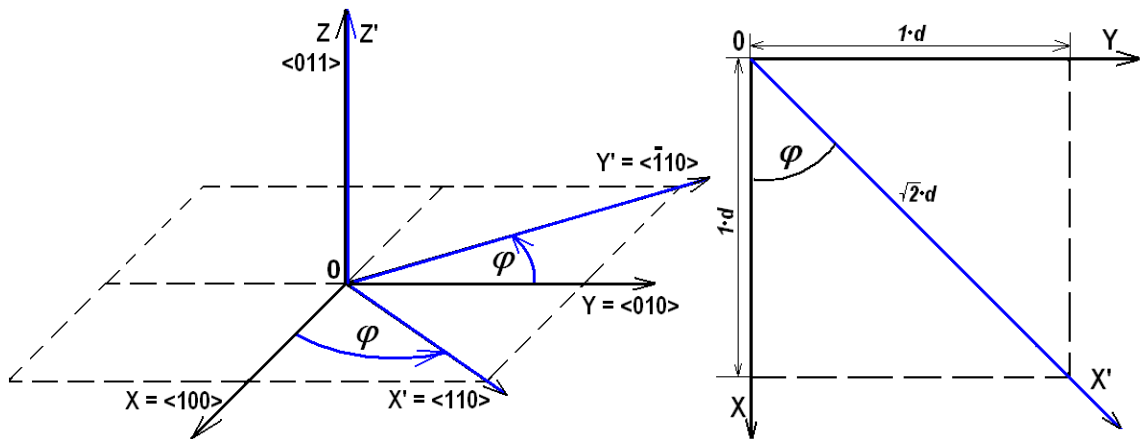


Рис. 1.7 Схема перехода координат в (100) в координаты (110).

Т.е. такой переход можно описать следующими формулами:

$$X' = X \cdot \cos(\varphi) + Y \cdot \sin(\varphi) = X \cdot \cos(45^\circ) + Y \cdot \sin(45^\circ) = X \cdot \frac{\sqrt{2}}{2} + Y \cdot \frac{\sqrt{2}}{2} = \frac{\sqrt{2}}{2} \cdot (X + Y)$$

$$Y' = Y \cdot \cos(\varphi) - X \cdot \sin(\varphi) = Y \cdot \cos(45^\circ) - X \cdot \sin(45^\circ) = Y \cdot \frac{\sqrt{2}}{2} - X \cdot \frac{\sqrt{2}}{2} = \frac{\sqrt{2}}{2} \cdot (Y - X)$$

$$Z' = Z$$

Для определения координат атомов в системе, соответствующей плоскости (111) необходимо повернуть систему координат (110) вокруг оси Y' (в плоскости $X'Z'$) на угол θ (рис. 1.8).

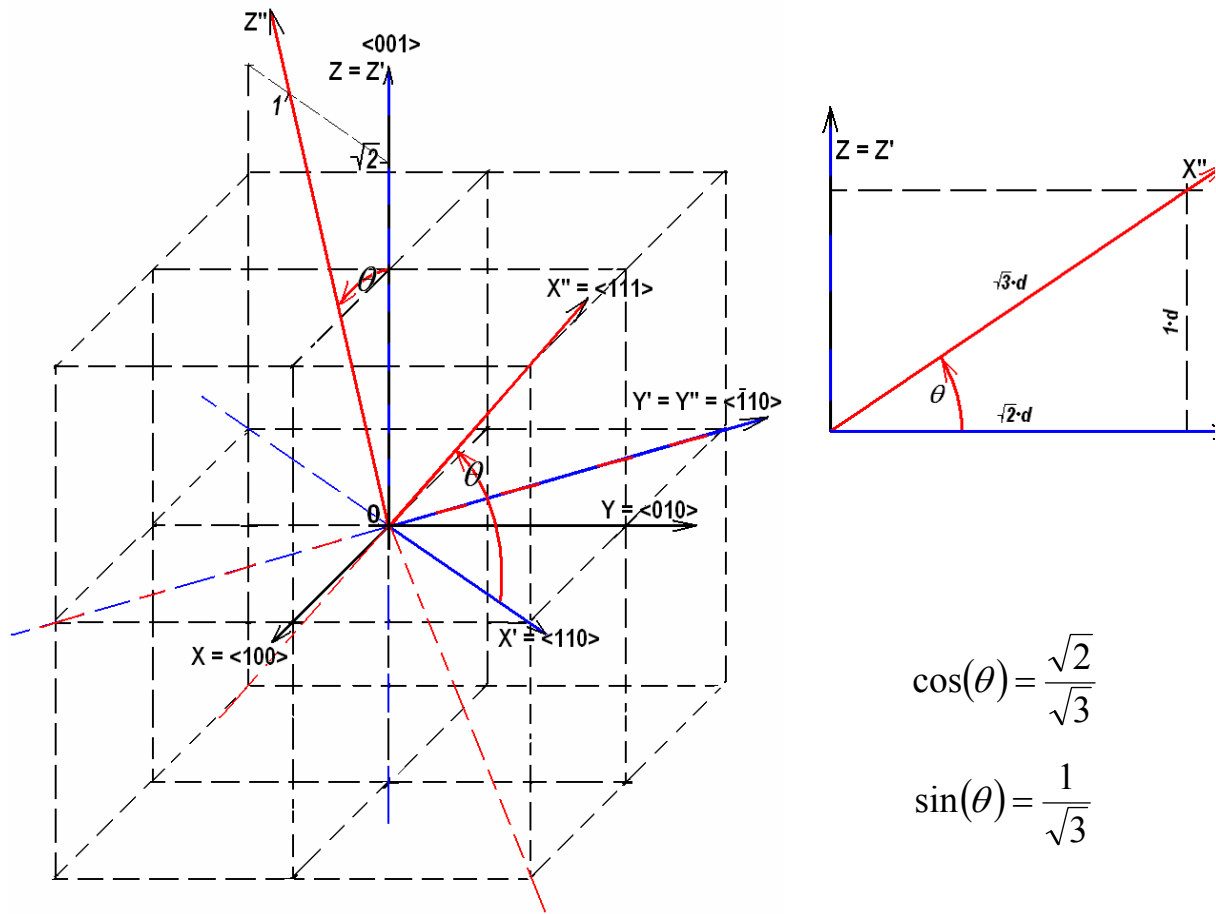


Рис. 1.8 Схема перехода координат в (110) в координаты (111).

Т.е. такой переход можно описать следующими формулами:

$$X'' = X' \cdot \cos(\theta) + Z' \cdot \sin(\theta) = X' \cdot \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} + Z' \cdot \frac{1}{\sqrt{3}}$$

$$Y'' = Y'$$

$$Z'' = Z' \cdot \cos(\theta) - X' \cdot \sin(\theta) = Z' \cdot \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} - X' \cdot \frac{1}{\sqrt{3}}$$

1.2. Характеристики алмазоподобных кристаллов

При описании свойств кристаллов в данной работе используются следующие характеристики кристаллов:

1. d - постоянная кристаллической решётки;
2. Z_2 – заряд ядра атома (зарядовое число);
3. M_2 - масса атома;
5. σ^2 - средний квадрат флуктуаций тепловых колебаний атомов кристалла.

В таблице 1.3 приведены значения указанных характеристик для кристаллов кремния, германия и алмаза.

Таблица 1.3

		кремний	германий	алмаз
Z_2		14	32	6
M_2 , а.е.м.		28.085	72.59	12.01
σ^2 , Å ²		0.075	0.085	0.258
d , Å		5.431	5.657	3.567
(100)	a_x , Å	5.431	5.657	3.567
	a_y , Å	5.431	5.657	3.567
	a_z , Å	5.431	5.657	3.567
(110)	a_x , Å	3.840	4.000	2.522
	a_y , Å	3.840	4.000	2.522
	a_z , Å	5.431	5.657	3.567
(111)	a_x , Å	3.136	3.266	2.059
	a_y , Å	3.840	4.000	2.522
	a_z , Å	4.434	4.619	2.912

1.3. Потенциальная энергия взаимодействия быстрых ионов с атомами кристалла

При движении в кристалле быстрая заряженная частица находится под действием электрических полей ядер атомов кристалла и их электронов. Поэтому для описания движения быстрой заряженной частицы необходимо учитывать взаимодействие частицы с каждым ядром и каждым электроном кристалла, что является практически невыполнимым.

Согласно теории каналирования, предложенной Линдхардом [2], при малом угле влёта быстрой заряженной частицы по отношению к кристаллографической плоскости её взаимодействие с последовательностью атомов скоррелировано, и в этом случае можно рассматривать движение быстрой заряженной частицы в усреднённом электрическом поле плоскостей. При этом движение тяжёлых релятивистских частиц (протонов, ионов), а также лёгких частиц (электронов) при энергиях выше 100 МэВ можно описать законами классической механики.

Суперпозиция усреднённых электрических полей от атомных плоскостей образует в пространстве между ними потенциальную яму $U(x)$ для положительно заряженных частиц.

Рассмотрим взаимодействие движущейся заряженной частицы с электрическим полем кристалла. Будем использовать атомную систему единиц. Электрический потенциал кристалла складывается из кулоновских потенциалов атомных ядер, расположенных в узлах кристаллической решетки, и кулоновских потенциалов атомных электронов:

$$U = U_{nucl} + U_{el} ,$$

где потенциалы взаимодействия быстрого иона с ядрами атомов и атомными электронами кристалла имеют вид:

$$U_{nucl} = \sum_n \frac{Z_1 Z_2 e^2}{|\vec{r} - \vec{r}_n|} , \quad U_{el} = - \sum_n \sum_{j=1}^{Z_2} \frac{Z_1 e^2}{|\vec{r} - \vec{r}_{nj}|} ,$$

здесь $Z_1 e$ и $Z_2 e$ - заряд иона и ядра атома кристалла; $\vec{r}_n = \vec{r}_{n0} + \delta\vec{r}_n$; вектор $\vec{r}_{n0} = \{a_x n_x, a_y n_y, a_z n_z\}$ определяет положение n -го узла кристаллической решетки; a_x - период решетки в направлении оси OX (рис. 1.9), а $n_x = 0; \pm 1; \pm 2; \dots$; вектор $\delta\vec{r}_n$ описывает смещение ядра n -го атома кристалла из узла кристаллической решетки благодаря тепловым колебаниям; $\vec{r}_{nj} = \vec{r}_n + \delta\vec{r}_{nj}$; вектор $\delta\vec{r}_{nj}$ определяет положение j -го электрона по отношению к положению n -го атомного ядра.

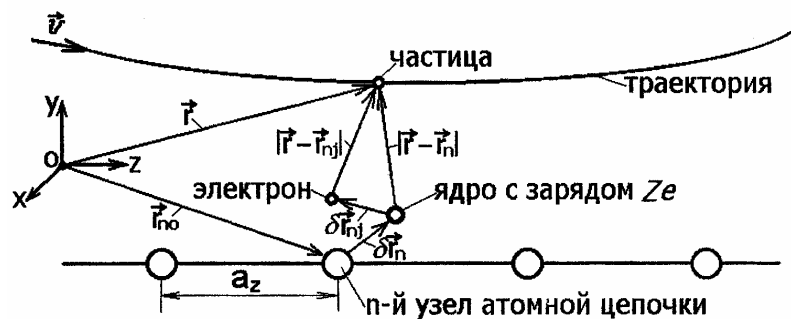


Рис. 1.9 Схематичное изображение траектории быстрой заряженной частицы в окрестности атомной цепочки [29].

Тепловые колебания атомных ядер и квантовые флуктуации атомных электронов вызывают флуктуации потенциала взаимодействия. Так как

учесть такие флуктуации сложно, часто используют усреднённые потенциалы изолированного атома, атомной цепочки, атомной плоскости. Усреднение производится по координатам всех ядер и электронов кристалла, и обозначается $\overline{\dots}$ [29].

Для численных расчётов движения быстрых заряженных частиц в кристаллах используют аппроксимации потенциала изолированного атома, например, аппроксимации Дойля-Тёрнера и Мольер.

Потенциал изолированного атома в приближении Дойля-Тёрнера имеет вид:

$$V(r) = 2a_0e^2Z_1 \cdot \sum_{i=1}^4 \left[\frac{\alpha_i}{\sqrt{2\pi B_i^3}} \exp\left(-\frac{r^2}{B_i}\right) \right],$$

где: $a_0 = 0.529 \text{ \AA}$ – радиус Бора; $B_i = \beta_i/4\pi^2$, значения коэффициентов α_i и β_i зависят от конкретного кристалла. В таблице 1.4 приведены значения коэффициентов приближения Дойля-Тёрнера для кристаллов кремния, германия и алмаза.

Потенциал изолированного атома в приближении Мольер имеет вид:

$$V(r) = \frac{Z_1Z_2e^2}{r} \sum_{i=1}^3 \alpha_i \cdot \exp\left(-\beta_i \frac{r}{a}\right),$$

где: $a = 0.88534 \cdot a_0 \cdot (Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{-1/2}$ – радиус экранирования Томаса-Ферми; α_i, β_i – безразмерные коэффициенты приближения Мольер. Значения коэффициентов приближения Мольер приведены в таблице 1.5.

Таблица 1.4 Коэффициенты приближения Дойля-Тёрнера для потенциала

	кремний	германий	алмаз
$\alpha_1, \text{ \AA}$	2.1293	2.4467	0.7307
$\alpha_2, \text{ \AA}$	2.5333	2.7015	1.1951
$\alpha_3, \text{ \AA}$	0.8349	1.6157	0.4563
$\alpha_4, \text{ \AA}$	0.3216	0.6009	0,1247
$\beta_1, \text{ \AA}^2$	57.7748	55.893	36.9951
$\beta_2, \text{ \AA}^2$	16.4756	14.393	11.2966
$\beta_3, \text{ \AA}^2$	2.8796	2.4461	2.8139
$\beta_4, \text{ \AA}^2$	0.3860	0.3415	0.3456

Таблица 1.5 Коэффициенты приближения Мольер

i	1	2	3
α_i	0.35	0.55	0.10
β_i	0.3	1.2	6.0

Преимущество приближения Мольер состоит в том, что приведённые коэффициенты можно применить для описания любого монокристалла. Кристалл в этом приближении определяется только зарядовым числом Z_2 .

Для описания потенциальной энергии взаимодействия быстрой заряженной частицы с атомами, образующими кристаллическую решётку применяют разложение в тригонометрический ряд Фурье:

$$U(r) = \sum_{\vec{g}} U(\vec{g}) \cdot \exp(i \cdot \vec{g} \cdot \vec{r}),$$

где $\vec{g} = (2\pi \cdot n_x / a_x, 2\pi \cdot k / a_y, 2\pi \cdot l / a_z)$ – вектор обратной решетки;

n_x, k, l – индексы Миллера (описывают атомную цепочку).

$$U(\vec{g}) = d^{-3} \sum_j V_j(g) \cdot \exp[-g^2 \sigma_j^2 / 2 - i \cdot \vec{g} \cdot \vec{r}_j],$$

где $\exp[-g^2 \sigma_j^2 / 2]$ – фактор Дебая-Валлера учитывает тепловые колебания ядер атомов кристалла; \vec{r}_j – координаты атомов в элементарной кристаллической ячейке; σ_j^2 – средний квадрат амплитуды тепловых колебаний атомов кристалла; $V_j(g)$ – компонента Фурье потенциальной энергии взаимодействия атома j -го сорта с быстрой заряженной частицей.

Таким образом, можно записать потенциал взаимодействия с учётом тепловых колебаний атомов кристалла и местоположений атомов в элементарной кристаллической ячейке, разложенный в тригонометрический ряд Фурье:

$$U(x) = d^{-3} \cdot \sum_{n_x} \sum_{j=1}^8 V(g_x) \cdot \exp[-\sigma^2 g_x^2 / 2] \cdot \cos[2\pi n_x \cdot (x - x_j)], \quad (1.1)$$

где: $V(g)$ – компонента Фурье потенциала отдельного атома, которая может быть записана в приближениях Мольер:

$$V(g^2) = 4\pi \cdot Z_1 Z_2 e^2 \cdot \sum_{i=1}^3 \alpha_i / [(\beta_i/a)^2 + g^2] \quad (1.2)$$

и Дойля-Тёрнера:

$$V(g^2) = 2\pi \cdot Z_1 \cdot e^2 \cdot a_0 \cdot \sum_{i=1}^4 \alpha_i \cdot \exp[-\beta_i \cdot g^2 / 16\pi^2]; \quad (1.3)$$

здесь α_i, β_i – коэффициенты, соответственно, приближений Мольера (табл. 1.4) или Дойля-Тёрнера (табл. 1.3); $g_x^2 = (2\pi \cdot n_x / a_x)^2$ – квадрат компоненты вектора обратной решётки; x_j – x -координаты атомов элементарной ячейки.

На рис. 1.10 представлены графики потенциальной энергии взаимодействия с протоном для плоскостных направлений (100), (110) и (111) кристалла кремния.

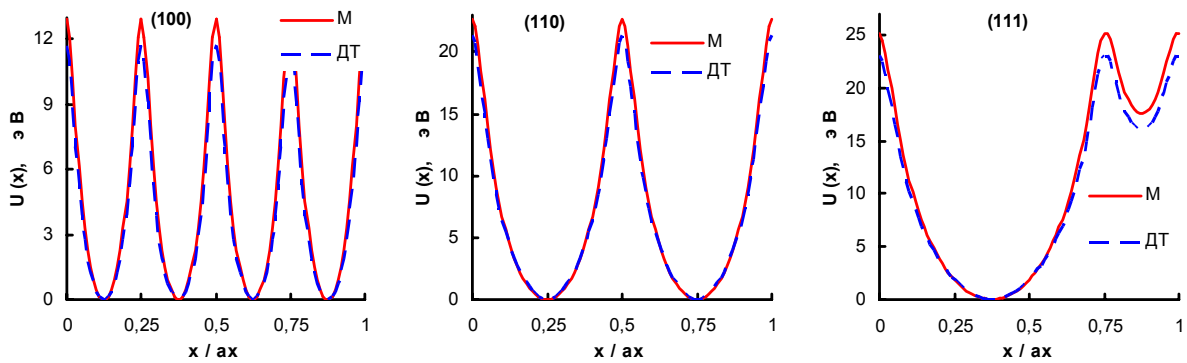


Рис. 1.10 Потенциалы плоскостных каналов кристалла кремния для протонов, вычисленные в приближениях Мольера и Дойля-Тёрнера.

1.4. Коэффициенты диффузии

Столкновения каналированных частиц с ядрами атомов кристалла и их электронами описываются с помощью коэффициентов диффузии. Можно выделить отдельно электронный коэффициент, ответственный за рассеяние на квантовых флуктуациях атомных электронов и ядерный коэффициент, ответственный за рассеяние на тепловых флуктуациях атомов.

$$D(x) = D_{el}(x) + D_{nucl}(x)$$

Электронный коэффициент диффузии будем вычислять в приближении локальной электронной плотности:

$$D_{el} = 2\pi/v \cdot (Z_1 Z_2 \cdot e^2) \cdot L_e \cdot \rho_{el}(x), \quad (1.4)$$

где: $L_e = \ln[2 \cdot m_e \cdot \beta^2 \cdot \gamma^2 / I] - \beta^2$ – электронный логарифм.

Ядерный коэффициент диффузии будем вычислять в приближении Китага-вы-Оцуки [22]:

$$D_{nucl} = 2\pi/v \cdot (Z_1 \cdot e^2) \cdot L_n \cdot \rho_{nucl}(x), \quad (1.5)$$

где в качестве L_n в случае релятивистских энергий используется “радиационный логарифм”: $L_n = 2 \cdot \ln[138 / Z_2^{1/3}]$, а в случае МэВ-энергий каналированных частиц – приближение, предложенное Линдхардом [2]: $L_n = \ln[1.29 \cdot a \cdot E \cdot M_2 / (Z_1 Z_2 \cdot (M_1 + M_2) \cdot e^2)]$.

$I = 11.5 \cdot Z_2$ – средний ионизационный потенциал для кристалла, E – энергия частицы, m_e – масса электрона, e^2 – заряд электрона, M_1, M_2 и Z_1, Z_2 – массы и заряды быстрой частицы и ядра атома кристалла,

$\rho_{el}(x), \rho_{nucl}(x)$ – плотности электронов и ядер в плоскостном канале кристалла можно записать в виде разложения в тригонометрический ряд Фурье:

$$\rho_{nucl}(x) = d^{-3} \cdot \sum_{n_x} \sum_{j=1}^8 \exp[-\sigma^2 g_x^2 / 2] \cdot \cos[2\pi n_x \cdot (x - x_j)], \quad (1.6)$$

$$\rho_{el}(x) = d^{-3} \cdot \sum_{n_x} \sum_{j=1}^8 F(g_x^2) \cdot \exp[-\sigma^2 g_x^2 / 2] \cdot \cos[2\pi n_x \cdot (x - x_j)], \quad (1.7)$$

где: F – форм-фактор, который можно вычислять в приближениях Мольер:

$$F(g_x) = Z_2 \cdot \sum_{i=1}^3 \alpha_i \cdot (\beta_i / a)^2 / [(\beta_i / a)^2 + g_x^2] \quad (1.8)$$

и Дойля-Тёрнера [30]:

$$F(g_x) = \sum_{i=1}^4 \alpha_i \cdot \exp[-\beta_i \cdot g_x^2 / (4\pi)^2] + c, \quad (1.9)$$

здесь: α_i, β_i, c – коэффициенты приближений Мольер (таблица 1.4) или Дойля-Тёрнера (таблица 1.6).

Рассмотрим вывод формулы для форм-фактора в приближении Мольер. Фурье-компонента может быть записана в видах [29]:

$$V(g_x) = 4\pi \cdot Z_1 \cdot Z_2 \cdot e^2 \cdot \sum_{j=1}^3 \frac{\alpha_i}{g_x^2 + (\beta_i / a)^2}$$

$$V(g_x) = \frac{4\pi \cdot Z_1 \cdot e^2}{g_x^2} \cdot [Z_2 - F(g_x)]$$

Приравняв правые части, получим:

$$\frac{1}{g_x^2} \cdot [Z_2 - F(g_x)] = Z_2 \cdot \sum_{j=1}^3 \frac{\alpha_i}{g_x^2 + (\beta_i/a)^2}$$

Откуда:

$$F(g_x) = Z_2 \cdot \left[1 - \sum_{i=1}^3 \frac{\alpha_i \cdot g_x^2}{g_x^2 + (\beta_i/a)^2} \right] = Z_2 \cdot \sum_{i=1}^3 \alpha_i \cdot \left[1 - \frac{g_x^2}{g_x^2 + (\beta_i/a)^2} \right]$$

Т.к. $\alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3 = 0.35 + 0.55 + 0.10 = 1$, выражение для форм-фактора окончательно запишется:

$$F(g_x) = Z_2 \cdot \sum_{i=1}^3 \frac{\alpha_i \cdot (\beta_i/a)^2}{g_x^2 + (\beta_i/a)^2}$$

здесь $g_x = 2\pi \cdot n_x / a_x$.

Значения коэффициентов α_i , β_i , и c для кристаллов кремния, германия и алмаза приведены в таблице 1.6.

Таблица 1.6

	кремний	германий	алмаз
$\alpha_1, \text{\AA}$	6.2915	10.0816	2.31
$\alpha_2, \text{\AA}$	3.0353	6.3747	1.02
$\alpha_3, \text{\AA}$	1.9891	3.7068	1.5886
$\alpha_4, \text{\AA}$	1.5410	3.6830	0.865
$\beta_1, \text{\AA}^2$	2.4386	2.8509	20.8439
$\beta_2, \text{\AA}^2$	32.3337	0.2516	10.2075
$\beta_3, \text{\AA}^2$	0.6785	11.4468	0.5687
$\beta_4, \text{\AA}^2$	81.6937	54.7625	51.6512
c	1.1407	2.1313	0.2156

На рис. 1.11 приведены графики ядерных плотностей плоскостных каналов кристалла кремния. На рис. 1.12 сравниваются графики электронных плотностей плоскостных каналов кристалла кремния, рассчитанные в приближениях Мольера и Дойля-Тёрнера. На рис. 1.13 сравниваются графики коэффициентов диффузии для протонов с энергией 450 ГэВ в плоскостных каналах кристалла кремния в случаях, когда электронная плотность вычисляет-

ся в приближениях Мольер и Дойля-Тёрнера. Можно видеть, что отличия по приближениям небольшие.

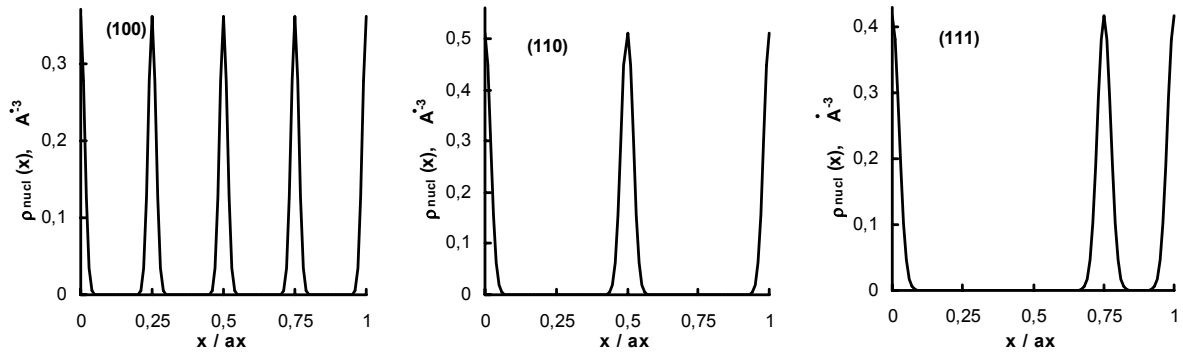


Рис. 1.11 Ядерные плотности плоскостных каналов (100), (110) и (111) кристалла кремния.

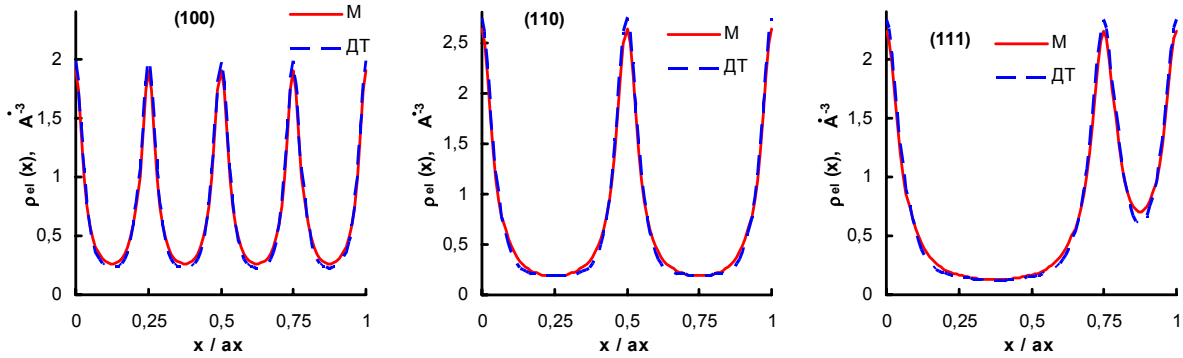


Рис. 1.12 Электронные плотности плоскостных каналов (100), (110) и (111) кристалла кремния, рассчитанные в приближениях Мольер и Дойля-Тёрнера.

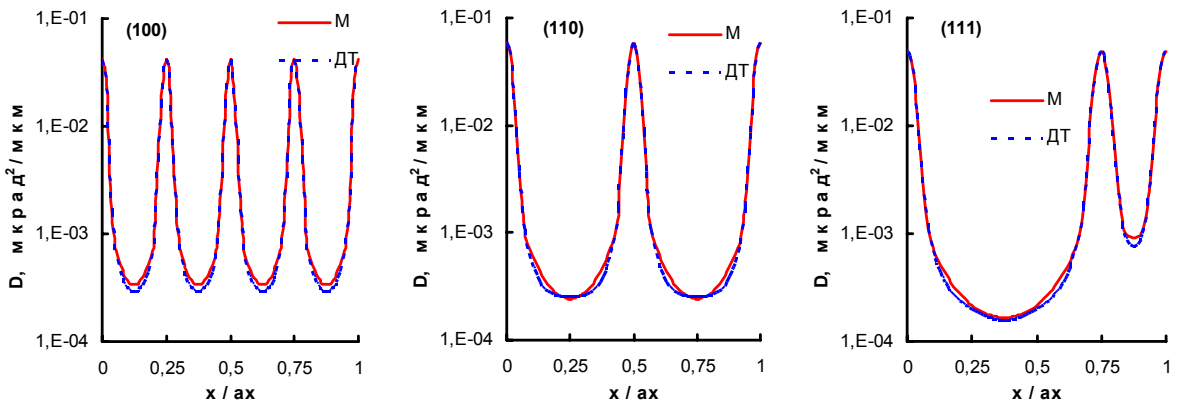


Рис. 1.13 Коэффициенты диффузии для протонов с энергией 450 ГэВ в плоскостных каналах (100), (110) и (111) кристалла кремния в случаях, когда электронная плотность вычисляется в приближениях Мольер и Дойля-Тёрнера.

1.5. Уравнение движения

Движение одного быстрого иона будем описывать с помощью классического уравнения движения

$$\frac{d}{dt}(m\dot{\vec{r}}) = \vec{f}, \quad (1.10)$$

где $m = \gamma \cdot m_0$; $\gamma = (1 - \beta^2)^{-1/2}$ - Лоренц-фактор; $\beta^2 = \dot{\vec{r}}^2 / c^2$; m_0 - масса покоя быстрого иона; c - скорость света; $\vec{f} = -\text{grad}U$; $U = U(x, y, z)$ - потенциальная энергия взаимодействия быстрого иона с атомами кристалла.

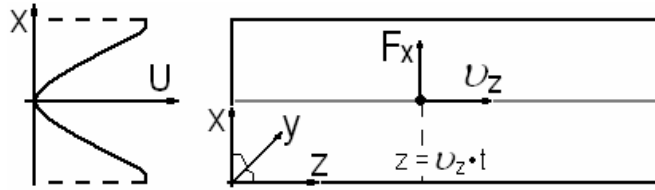


Рис. 1.14 Схема движения каналированной частицы в канале.

Систему координат выберем таким образом, чтобы ось OX была перпендикулярна, а ось OY была параллельна атомным плоскостям, но перпендикулярна направлению падения ионов на кристалл, которое происходит в направлении оси OZ (рис. 1.14). Решение уравнения (1.10) будем искать в малоугловом приближении, которое имеет вид

$$f_z = 0. \quad (1.11)$$

Условие (1.11) обеспечивает движение иона с постоянной скоростью на небольших отрезках траектории в направлении оси OZ , т.е.

$$\beta \approx (\dot{z}/c) = \text{const}$$

Нелинейное стохастическое уравнение (1.10) может быть линеаризовано с помощью разложения в ряд по малому параметру (метод малого шума [26]), роль которого играет флуктуация потенциала. В случае плоскостного каналирования, решение уравнения (1.10) представим в виде суммы двух независимых движений, одно из которых происходит по регулярной траектории, а другое является малой флуктуирующей добавкой

$$x = \bar{x} + \delta x$$

Выражение для потенциала разложим в ряд по степеням δx в окрестности регулярной траектории, учитывая только линейные по δx члены

$$\bar{U}(\bar{x} + \delta x) \approx \bar{U}(\bar{x}) + \bar{U}_x(\bar{x})\delta x,$$

$$\delta U(\bar{x} + \delta x, z) \approx \delta \bar{U}(\bar{x}, z),$$

где $z \approx v \cdot t$; v - скорость каналированной частицы.

В результате получим систему уравнений, одно из которых описывает движение частиц по регулярной траектории

$$m\ddot{\bar{x}} = \bar{f}_x,$$

а другое – по хаотической

$$m\delta\ddot{x} + \bar{U}_{xx}\delta x = \delta f_x$$

где $\bar{f}_x = -\partial\bar{U}(\bar{x}, z)/\partial\bar{x}$; $\delta f_x = -\partial(\delta U(\bar{x}, z))/\partial\bar{x}$; $\bar{U}_{xx} = (\partial^2\bar{U}/\partial\bar{x}^2)$.

1.5.1. Описание флуктуаций

Запишем систему уравнений, описывающих движение каналированных частиц в направлении, перпендикулярном атомным плоскостям

$$m\ddot{\bar{x}} + \bar{U}_x = 0, \quad (1.12)$$

$$m\delta\ddot{x} + \bar{U}_{xx}\delta x = \delta f_x(\bar{x}, t), \quad (1.13)$$

где $\delta f_x = \delta f_x(\bar{x}, t)$, $\delta x = \delta x(x, y, z, \delta \vec{r}_j)$, $\bar{U}_x = \partial U/\partial x$.

Составим систему уравнений для средних квадратов флуктуаций динамических величин.

Получим уравнение для среднего квадрата флуктуаций быстрой заряженной частицы по поперечной координате: $\delta x^2 = (\delta x)^2 = \delta x \cdot \delta x$

Найдём производную от δx^2 по следующей формуле:

$$\frac{d}{dt}\delta x^2 = 2 \cdot \delta x \cdot \frac{d}{dt}\delta x = 2 \cdot \delta x \cdot \delta \dot{x}$$

Усредним производную от δx^2 по t . При этом среднее от производной равно производной от среднего, т.к. δx^2 не зависит от времени:

$$\overline{\frac{d}{dt}\delta x^2} = \frac{d}{dt}\overline{\delta x^2}$$

$$\frac{d}{dt} \overline{\delta x^2} = 2 \cdot \overline{\delta x \cdot \delta \dot{x}} \quad (1.14)$$

Получим уравнение для смешанного момента:

$$\frac{d}{dt} (\delta x \cdot \delta \dot{x}) = \delta \dot{x} \cdot \delta \dot{x} + \delta x \cdot \delta \ddot{x} = \delta \dot{x}^2 + \frac{1}{m} \delta x \cdot (\delta f - U_{xx}(x) \cdot \delta x)$$

$\delta \ddot{x}$ получим из (1.13):

$$\delta \ddot{x} = (\delta f - U_{xx} \cdot \delta x) / m \quad (1.15)$$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \overline{\delta x \delta \dot{x}} &= \overline{\delta \dot{x}^2} + \frac{1}{m} \overline{\delta x \cdot (\delta f - U_{xx}(x) \cdot \delta x)} \\ \frac{d}{dt} \overline{\delta x \delta \dot{x}} &= \overline{\delta \dot{x}^2} + \frac{1}{m} \overline{\delta x \delta f(\bar{x}, t)} - \frac{1}{m} \overline{U_{xx}(x) \cdot \delta x^2} \end{aligned} \quad (1.16)$$

Получим уравнение для среднего квадрата флуктуаций быстрой заряженной частицы по поперечной скорости:

$$\begin{aligned} \frac{d \delta \dot{x}^2}{dt} &= 2 \cdot \delta \dot{x} \cdot \delta \ddot{x} \\ \frac{d}{dt} \overline{\delta \dot{x}^2} &= 2 \cdot \overline{\delta \dot{x} \cdot \delta \ddot{x}} \end{aligned}$$

С учётом (1.15) окончательно запишем:

$$\frac{d}{dt} \overline{\delta \dot{x}^2} = \frac{2}{m} \cdot [\overline{\delta \dot{x} \delta f(\bar{x}, t)} - U_{xx}(x) \cdot \overline{\delta \dot{x} \delta x}] \quad (1.17)$$

Из (1.14), (1.16) и (1.17) можно составить систему уравнений для вторых моментов функции распределения:

$$\begin{cases} \frac{d}{dt} \overline{\delta x^2} = 2 \overline{\delta x \delta \dot{x}} \\ \frac{d}{dt} \overline{\delta x \delta \dot{x}} = \overline{\delta \dot{x}^2} - \frac{1}{m} \overline{U_{xx} \delta x^2} + \frac{1}{m} \overline{\delta x \delta f_x(\bar{x}, t)} \\ \frac{d}{dt} \overline{\delta \dot{x}^2} = -\frac{2}{m} \overline{U_{xx} \delta x \delta \dot{x}} + \frac{2}{m} \overline{\delta \dot{x} \delta f_x(\bar{x}, t)} \end{cases} \quad (1.18)$$

Вычислим корреляционные функции $\overline{\delta x \delta f_x(\bar{x}, t)}$ и $\overline{\delta \dot{x} \delta f_x(\bar{x}, t)}$. Частное решение уравнения (1.12) найдем с помощью метода вариации произвольных постоянных

$$\delta x = C_1 \delta x_1 + C_2 \delta x_2, \quad (1.19)$$

где δx_1 и δx_2 – решения однородного дифференциального уравнения:

$$m\delta\ddot{x}_{1,2} + \bar{U}_{xx}\delta x_{1,2} = 0.$$

Тогда можем составить следующую систему уравнений для определения произвольных постоянных C_1 и C_2 :

$$\begin{cases} \dot{C}_1 \delta x_1 + \dot{C}_2 \delta x_2 = 0 \\ \dot{C}_1 \delta \dot{x}_1 + \dot{C}_2 \delta \dot{x}_2 = \frac{\delta f(\bar{x}, t)}{m} \end{cases} \quad (1.20)$$

Постоянные C_1 и C_2 будем определяем из следующих выражений:

$$\dot{C}_1 = \frac{\Delta_1}{\Delta} \quad \dot{C}_2 = \frac{\Delta_2}{\Delta} \quad (1.21)$$

где Δ – определитель системы уравнений (1.11):

$$\Delta = \begin{vmatrix} \delta x_1 & \delta x_2 \\ \delta \dot{x}_1 & \delta \dot{x}_2 \end{vmatrix} = \delta x_1 \delta \dot{x}_2 - \delta x_2 \delta \dot{x}_1$$

Δ_1 и Δ_2 – также определители системы (1.20) составленные соответственно относительно первого и второго столбца:

$$\Delta_2 = \begin{vmatrix} \delta x_1 & 0 \\ \delta \dot{x}_1 & \frac{\delta f}{m} \end{vmatrix} = -\delta x_1 \frac{\delta f}{m}.$$

Теперь зная Δ , Δ_1 и Δ_2 перепишем выражения (1.21) для произвольных постоянных \dot{C}_1 , \dot{C}_2 следующим образом:

$$\dot{C}_1 = -\frac{1}{m} \frac{\delta x_2 \delta f}{\delta x_1 \delta \dot{x}_2 - \delta x_2 \delta \dot{x}_1}, \quad \dot{C}_2 = -\frac{1}{m} \frac{\delta x_1 \delta f}{\delta x_1 \delta \dot{x}_2 - \delta x_2 \delta \dot{x}_1}.$$

Откуда искомые коэффициенты C_1 и C_2 , необходимые для получения решения уравнения движения по хаотической траектории, получим как:

$$C_1(t) = -\frac{1}{m} \int \frac{\delta x_2(t') \delta f(t')}{\delta x_1(t') \delta \dot{x}_2(t') - \delta x_2(t') \delta \dot{x}_1(t')} dt',$$

$$C_2(t) = -\frac{1}{m} \int \frac{\delta x_1(t') \delta f(t')}{\delta x_1(t') \delta \dot{x}_2(t') - \delta x_2(t') \delta \dot{x}_1(t')} dt'.$$

С учетом этого решение интересующего нас уравнения (1.19) представимо в следующем виде:

$$\begin{aligned} \delta x(t) = & -\frac{\delta x_1(t)}{m} \int \frac{\delta x_2(t') \delta f(t')}{\delta x_1(t') \delta \dot{x}_2(t') - \delta x_2(t') \delta \dot{x}_1(t')} dt' + \\ & + \frac{\delta x_2(t)}{m} \int \frac{\delta x_1(t') \delta f(t')}{\delta x_1(t') \delta \dot{x}_2(t') - \delta x_2(t') \delta \dot{x}_1(t')} dt' \end{aligned}$$

Или после небольшого элементарного преобразования:

$$\delta x(t) = \frac{1}{m} \int \frac{[\delta x_2(t) \delta x_1(t') - \delta x_1(t) \delta x_2(t')] \delta f(t')}{[\delta x_1(t') \delta \dot{x}_2(t') - \delta x_2(t') \delta \dot{x}_1(t')]} dt'.$$

Корреляционные функции $\overline{\delta x \delta f_x(\bar{x}, t)}$ и $\overline{\delta \dot{x} \delta f_x(\bar{x}, t)}$ можно записать как:

$$\begin{aligned} \overline{\delta x(t) \delta f_x(\bar{x}, t)} &= \frac{1}{m} \int_0^t \frac{[\delta x_2(t) \delta x_1(t') - \delta x_1(t) \delta x_2(t')] \cdot \overline{\delta f_x(\bar{x}, t) \delta f_x(\bar{x}', t')}}{[\delta x_1(t') \delta \dot{x}_2(t') - \delta x_2(t') \delta \dot{x}_1(t')]} dt', \\ \overline{\delta \dot{x}(t) \delta f_x(\bar{x}, t)} &= \frac{1}{m} \int_0^t \frac{[\delta \dot{x}_2(t) \delta x_1(t') - \delta \dot{x}_1(t) \delta x_2(t')] \cdot \overline{\delta f_x(\bar{x}, t) \delta f_x(\bar{x}', t')}}{[\delta x_1(t') \delta \dot{x}_2(t') - \delta x_2(t') \delta \dot{x}_1(t')]} dt', \end{aligned}$$

где $\delta f_x(\bar{x}', t') \equiv \delta f_x[\bar{x}(t'), t']$.

В [29] было показано, что если корреляционная функция флуктуаций случайной силы является дельта – коррелированной

$$\overline{\delta f_x(\bar{x}, t) \delta f_x(\bar{x}', t')} = D(\bar{x}) \delta(t - t'),$$

$$\text{то } \overline{\delta x(t) \delta f_x(\bar{x}, t)} = 0 \text{ и } \overline{\delta \dot{x}(t) \delta f_x(\bar{x}, t)} = \frac{1}{2} \frac{D(\bar{x})}{m}.$$

Таким образом, система уравнений (1.10) примет вид

$$\begin{cases} \frac{d}{dt} \overline{\delta x^2} = 2 \overline{\delta x \delta \dot{x}} \\ \frac{d}{dt} \overline{\delta x \delta \dot{x}} = \overline{\delta \dot{x}^2} - \frac{1}{m} \overline{U_{xx}} \overline{\delta x^2} \\ \frac{d}{dt} \overline{\delta \dot{x}^2} = -\frac{2}{m} \overline{U_{xx}} \overline{\delta x \delta \dot{x}} + \frac{D(\bar{x})}{m^2} \end{cases} \quad (1.22)$$

Система уравнений (1.22) и уравнение движения решают задачу описания процесса многократного рассеяния каналированных ионов в плоскостных каналах кристалла на небольших отрезках траектории, длина которых ограничена неравенствами

$$\overline{\delta x(t)^2} < \bar{x}(t)^2, \quad \overline{\delta \dot{x}(t)^2} < \dot{\bar{x}}(t)^2.$$

Неравенства (1.14) определяют область применимости метода малого шума, а именно: средние квадраты флуктуаций динамических величин, таких как поперечная координата и скорость, должны быть меньше квадратов их средних значений, после прохождения каналированной частицей отрезка траектории пропорционального времени t .

1.5.2. Уравнение Фоккера-Планка

Уравнение Фоккера-Планка в фазовом пространстве поперечных координат и скоростей, которое применяют для описания эффекта плоскостного каналирования, имеет вид:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \dot{x} \frac{\partial f}{\partial x} + \frac{F(x)}{m} \frac{\partial f}{\partial \dot{x}} = \varepsilon \cdot \frac{D(x)}{2m^2} \frac{\partial^2 f}{\partial \dot{x}^2}$$

Здесь: $D(x)$ – коэффициент диффузии, $F(x) = -\partial U / \partial x$ – коэффициент сноса.

Уравнение Фоккера-Планка подобного вида встречается в различных областях физики. В частности, при описании процесса деления тяжёлых ядер более 20 лет назад был предложен метод решения этого уравнения в работе [32].

Решение будем искать методом малого шума (разложением в ряд в соответствии с теорией возмущений):

$$f = f^{(0)} + \varepsilon f^{(1)} + \dots,$$

здесь ε – формальный параметр, вводимый с целью обозначения коэффициентов одного порядка малости.

В нулевом приближении пренебрегаем многократным рассеянием, т.е. полагаем $D = 0$, тогда:

$$\frac{\partial f^{(0)}}{\partial t} + \dot{x} \frac{\partial f^{(0)}}{\partial x} + \frac{F(x)}{m} \frac{\partial f^{(0)}}{\partial \dot{x}} = 0.$$

Мы получили уравнение Лиувилля. Решение его есть произведение двух дельта-функций Дирака: $f^{(0)} = \delta(x - \bar{x}(t)) \cdot \delta(\dot{x} - \dot{\bar{x}}(t))$, где $\dot{\bar{x}}(t) = d\bar{x}(t)/dt$, $\bar{x}(t)$ – является решением уравнения Ньютона:

$$m \frac{d^2 \bar{x}}{dt^2} = F(\bar{x})$$

со следующими начальными условиями: $\bar{x}_0 = \bar{x}(t=0)$; $\dot{\bar{x}}_0 = \dot{\bar{x}}(t=0)$.

Найдём вид уравнения Фоккера-Планка в первом порядке теории возмущений:

$x = \bar{x} + \varepsilon \eta$, $\dot{x} = \dot{\bar{x}} + \varepsilon \dot{\eta}$; $\eta = (x - \bar{x})/\varepsilon$, $\dot{\eta} = (\dot{x} - \dot{\bar{x}})/\varepsilon$ - флуктуации поперечной координаты и скорости.

Обозначим $s = t$, $P(\eta, \dot{\eta}, s) = \varepsilon f(x, \dot{x}, t)$

Найдём производные, входящие в уравнение Фоккера-Планка:

$$\frac{\partial P}{\partial t} = \frac{\partial P}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial t} + \frac{\partial P}{\partial \dot{\eta}} \frac{\partial \dot{\eta}}{\partial t} + \frac{\partial P}{\partial s} \frac{\partial s}{\partial t} = -\frac{\dot{\bar{x}}}{\varepsilon} \frac{\partial P}{\partial \eta} - \frac{\ddot{\bar{x}}}{\varepsilon} \frac{\partial P}{\partial \dot{\eta}} + \frac{\partial P}{\partial s};$$

$$\frac{\partial P}{\partial x} + \frac{\partial P}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial x} = \frac{1}{\varepsilon} \frac{\partial P}{\partial \eta}; \quad \frac{\partial P}{\partial \dot{x}} + \frac{\partial P}{\partial \dot{\eta}} \frac{\partial \dot{\eta}}{\partial \dot{x}} = \frac{1}{\varepsilon} \frac{\partial P}{\partial \dot{\eta}};$$

$$\frac{\partial^2 P}{\partial \dot{x}^2} = \frac{1}{\varepsilon^2} \frac{\partial^2 P}{\partial \dot{\eta}^2}$$

Подставляем производные в уравнение Фоккера-Планка:

$$\frac{\partial P}{\partial t} + \dot{x} \frac{\partial P}{\partial x} + \frac{F(x)}{m} \frac{\partial P}{\partial \dot{x}} = \varepsilon^2 \frac{D(x)}{2m^2} \frac{\partial^2 P}{\partial \dot{x}^2}$$

$$\frac{\partial P}{\partial s} - \frac{\dot{\bar{x}}}{\varepsilon} \frac{\partial P}{\partial \eta} - \frac{1}{\varepsilon} \frac{F(\bar{x})}{m} \frac{\partial P}{\partial \dot{\eta}} + (\dot{\bar{x}} + \varepsilon \dot{\eta}) \frac{1}{\varepsilon} \frac{\partial P}{\partial \eta} + \frac{F(\bar{x} + \varepsilon \eta)}{m\varepsilon} \frac{\partial P}{\partial \dot{\eta}} = \varepsilon^2 \frac{D(\bar{x} + \varepsilon \eta)}{2m^2} \frac{1}{\varepsilon^2} \frac{\partial^2 P}{\partial \dot{\eta}^2}$$

$$\frac{\partial P}{\partial s} + \dot{\eta} \frac{\partial P}{\partial \eta} + \frac{[F(\bar{x} + \varepsilon \eta) - F(\bar{x})]}{m\varepsilon} \frac{\partial P}{\partial \dot{\eta}} = \frac{D(\bar{x} + \varepsilon \eta)}{2m^2} \frac{\partial^2 P}{\partial \dot{\eta}^2}$$

$$F(\bar{x} + \varepsilon \eta) \approx F(\bar{x}) + F'(\bar{x}) \cdot \varepsilon \eta + \dots; \quad F'(\bar{x}) = -U_{xx}(\bar{x}); \quad D(\bar{x} + \varepsilon \eta) \approx D(\bar{x}) + \dots$$

$$\frac{\partial P}{\partial s} + \dot{\eta} \frac{\partial P}{\partial \eta} + \frac{F'(\bar{x})}{m} \eta \frac{\partial P}{\partial \dot{\eta}} = \frac{D(\bar{x})}{2m^2} \frac{\partial^2 P}{\partial \dot{\eta}^2}.$$

Таким образом, в первом порядке теории возмущения уравнение Фоккера-Планка имеет вид:

$$\frac{\partial f^{(1)}}{\partial t} + \dot{\eta} \frac{\partial f^{(1)}}{\partial \eta} + \frac{F'(\bar{x}(t))}{m} \frac{\partial f^{(1)}}{\partial \dot{\eta}} = \frac{D(\bar{x}(t))}{2m^2} \frac{\partial^2 f^{(1)}}{\partial \dot{\eta}^2},$$

здесь коэффициенты диффузии $D(\bar{x}(t))$ и сноса $F(\bar{x}(t))$ являются функциями решения уравнения Ньютона. Т.е. мы получили уравнение, в котором коэффициенты зависят не от поперечной координаты, а от времени.

Решением последнего уравнения является функция распределения флуктуаций поперечной координаты и скорости:

$$f^{(1)}(\eta, \dot{\eta}, t) = (2\pi\Delta)^{-1} \exp \left[- \left(\dot{\eta}^2 \overline{(\delta x)^2} + \eta^2 \overline{(\delta \dot{x})^2} - 2\dot{\eta}\eta \overline{\delta x \delta \dot{x}} \right) / 2\Delta^2 \right],$$

где $\Delta^2 = \overline{(\delta \dot{x})^2} \overline{(\delta x)^2} - \overline{\delta x \delta \dot{x}}^2$,

если вторые моменты удовлетворяют системе уравнений (1.22).

1.6. Потенциал переходной области ось-плоскость

Рассмотрим движение быстрой заряженной частицы в кристалле. Уравнение движения для неё имеет вид:

$$m \frac{d^2 \vec{r}}{dt^2} = -grad U(r) \quad (1.23)$$

Потенциальная энергия взаимодействия протона с атомами образующими кубическую кристаллическую решетку со сложным базисом, имеет вид

$$U(r) = \sum_{\vec{g}} U(\vec{g}) \cdot \exp(i \cdot \vec{g} \cdot \vec{r}),$$

$$U(\vec{g}) = \frac{1}{d^3} \sum_j V_j(g) \cdot \exp \left[- \frac{g^2 \cdot \sigma_j^2}{2} - i \cdot \vec{g} \cdot \vec{r}_j \right],$$

Движение каналированных частиц в плоскости ZOY , которая компланарна соответствующей кристаллографической плоскости, на небольших участках траектории можно считать свободным. Пусть

$$\tau = v \cdot t; \quad y = \tau \cdot \sin \theta; \quad z = \tau \cdot \cos \theta,$$

где θ – угол влета частиц в кристалл, в плоскости ZOY .

Перепишем уравнение движения с учетом (1.17) в виде

$$\frac{d^2 x}{d\tau^2} = -\frac{\varepsilon^2}{V_{\max}} \frac{\partial}{\partial x} U(x, \tau), \quad (1.24)$$

где $\varepsilon^2 = V_{\max}/pv$ – квадрат малого безразмерного параметра ε ; V_{\max} – максимальное значение непрерывного потенциала атомной плоскости кристалла.

С помощью метода многих масштабов [26], [33] будем искать решение уравнения (1.24) в виде ряда по степеням малости ε

$$x = x_0(T_0, T_1, T_2, \dots) + \varepsilon \cdot x_1(T_0, T_1, T_2, \dots) + \varepsilon^2 \cdot x_2(T_0, T_1, T_2, \dots),$$

где $T_0 = \tau$, $T_1 = \varepsilon \cdot \tau$, $T_2 = \varepsilon^2 \cdot \tau$.

Уравнение (1.24) в новых переменных имеет вид

$$\begin{aligned} & \frac{\partial^2 x_0}{\partial T_0^2} + \varepsilon \cdot \left(\frac{\partial^2 x_1}{\partial T_0^2} + 2 \frac{\partial^2 x_0}{\partial T_0 \cdot \partial T_1} \right) + \\ & + \varepsilon^2 \cdot \left(\frac{\partial^2 x_2}{\partial T_0^2} + 2 \frac{\partial^2 x_1}{\partial T_0 \cdot \partial T_1} + \frac{\partial^2 x_0}{\partial T_1^2} + 2 \frac{\partial^2 x_0}{\partial T_0 \cdot \partial T_2} + \frac{\partial}{\partial x_0} \frac{U(x_0, T_0)}{V_{\max}} \right) = 0 \end{aligned}$$

Решения уравнений нулевого и первого порядков малости по ε , в которых исключены секулярные слагаемые, имеют вид

$$x_0 = x_0(T_1, T_2, \dots); \quad x_1 = x_1(T_1, T_2, \dots).$$

Уравнение второго порядка малости по ε имеет вид

$$\frac{\partial^2 x_2}{\partial T_0^2} + \frac{\partial^2 x_0}{\partial T_1^2} = -\frac{1}{V_{\max}} \cdot \frac{\partial}{\partial x_0} \sum_{\vec{g}} U(\vec{g}) \cdot \exp\{i[x_0 \cdot g_x + T_0(g_y \sin \theta + g_z \cos \theta)]\} \quad (1.25)$$

Пусть $\theta = \theta_{k\ell} + \Delta\theta$, т.е. рассмотрим движение каналированных частиц под малым углом $\Delta\theta \geq \varepsilon$ к одной из кристаллографической осей, из которых состоит атомная плоскость. Тогда угол $\theta_{k\ell}$, определяющий направление кристаллографической оси $\langle 0k\ell \rangle$ в атомной плоскости (100), связан с коэффициентами ряда Фурье $n_y = k$ и $n_z = \ell$ соотношением

$$g_{yk} \cdot \sin \theta_{k\ell} + g_{z\ell} \cdot \cos \theta_{k\ell} = 0,$$

где $g_{yk} = 2\pi \cdot k / a_y$ и $g_{z\ell} = 2\pi \cdot \ell / a_z$.

Для того чтобы исследовать движение каналированных частиц в другом плоскостном канале необходимо осуществить переход к новой системе координат, которая будет повернута относительно старой системы координат на заданный угол, и пересчитать координаты атомов в элементарной ячейке относительно этой новой системы координат. Таким образом, при $n_y = k$, $n_z = \ell$ и $\Delta\theta \geq \varepsilon$ в уравнении (1.25) появляется малый параметр $g_{k\ell} = [k \cdot \sin(\theta_{k\ell} + \Delta\theta) + \ell \cdot \cos(\theta_{k\ell} + \Delta\theta)] \geq \varepsilon$, если мы совершим масштабное преобразование $\tau \rightarrow 2\pi \cdot \tau / d$ и $x \rightarrow 2\pi \cdot x / d$, относительно которого инвариантно уравнение движения. Интегрируя уравнение по T_0 , приравняем к нулю секулярное слагаемое, что даст нам уравнение эволюции для $x_0 = x_0(T_1, T_2, \dots)$, которое имеет вид

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 x_0}{\partial T_1^2} = & -\frac{1}{V_{\max}} \frac{\partial}{\partial x_0} \sum_{g_x} \{ U(g_x, 0, 0) \cdot \exp(i \cdot x_0 \cdot g_x) + \\ & + U(g_x, g_{yk}, g_{z\ell}) \cdot \exp\left(i \cdot \left[x_0 g_x + \frac{2\pi \cdot g_{k\ell}}{\varepsilon \cdot d} T_1 \right] \right) \} \end{aligned} \quad (1.26)$$

Решение уравнения (1.25) для $x_2 = x_2(\tau_0, \tau_1, \dots)$ является быстроосциллирующей функцией второго порядка малости по ε к решению уравнения (1.26), которое описывает траектории каналированных протонов в переходной области ось-плоскость. Таким образом, потенциал переходной области ось-плоскость имеет вид:

$$\begin{aligned} U_{sp}(x, t) = & \sum_{g_x} \{ U(g_x, 0, 0) \cdot \exp(i \cdot x \cdot g_x) + \\ & + U(g_x, g_{yk}, g_{z\ell}) \cdot \exp[i \cdot (x \cdot g_x + \omega_{k\ell} \cdot t)] \} \end{aligned} \quad (1.27)$$

где $\omega_{kl} = 2\pi \cdot v \cdot g_{kl} / d$ - частота, с которой протон пересекает атомные цепочки $\langle 0k\ell \rangle$, лежащие в атомной плоскости (100).

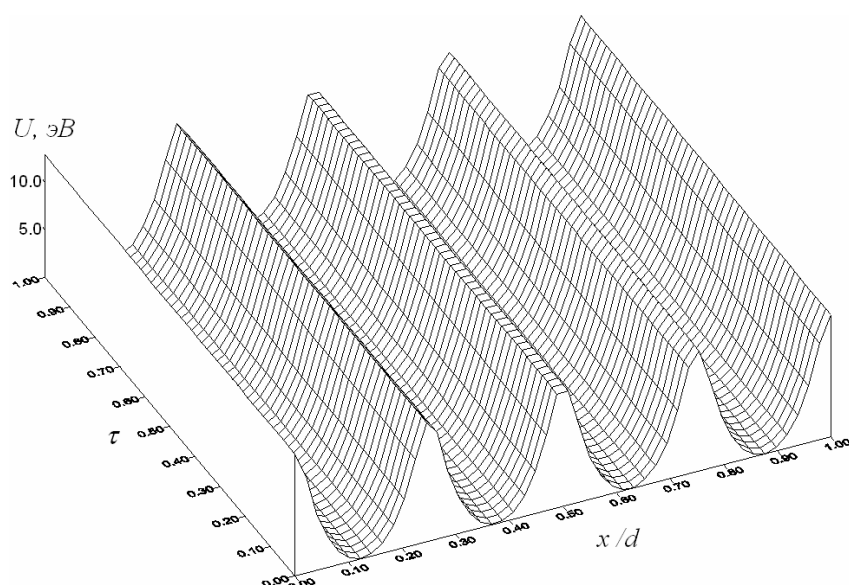


Рис. 1.15 Потенциал переходной области ось-плоскость для протонов в плоскостном направлении (100) при угле разориентации $\Delta\theta \geq \varepsilon$ по отношению к атомной цепочке $\langle 010 \rangle$. По осям отложены: x/d – поперечная координата в единицах постоянной решётки, τ – безразмерная глубина, U – высота потенциального барьера.

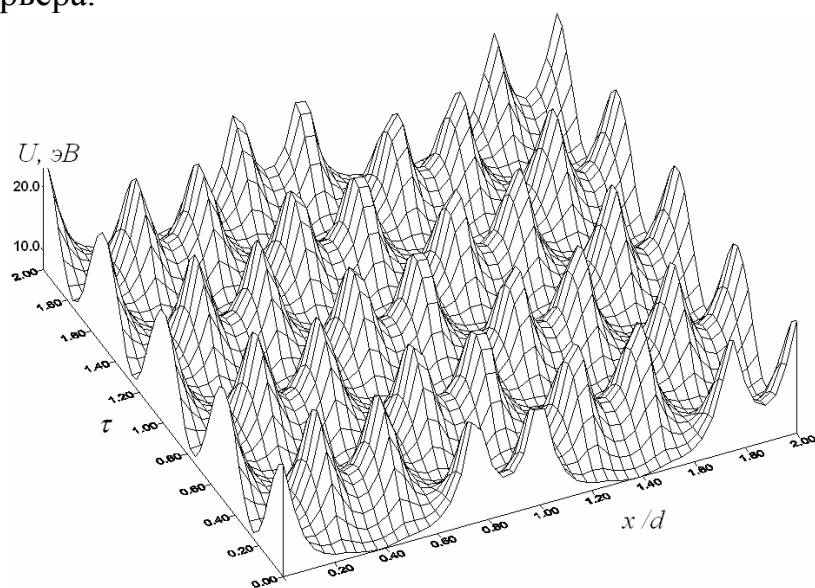


Рис. 1.16 Потенциал переходной области ось-плоскость для протонов в плоскостном направлении (100) при угле разориентации $\Delta\theta = 5 \cdot \varepsilon$ по отношению к атомной цепочке $\langle 011 \rangle$. Обозначения такие же как на рис. 1.15. Можно видеть, что в этом случае потенциал изменяется периодически в зависимости от глубины проникновения.

Можно показать, что в (100) плоскостных каналах кремния, германия и алмаза второе слагаемое в формуле (1.27) равно нулю при $|l| + |k| = \pm 1, \pm 2, \dots$. Потенциал переходной области ось-плоскость получен при условии $\Delta\theta \geq \varepsilon$, поскольку при меньших углах разориентации нарушается условие применимости формулы (1.23), так как протоны в этом случае совершают финитное

движение в осевом канале кристалла, образованном цепочками $\langle 0kl \rangle$. Верхнюю границу угла разориетации $\Delta\theta$ можно оценить как угловое расстояние от выделенной атомной цепочки $\langle 0kl \rangle$ до ближайшей высокоиндексной кристаллографической оси, которая может оказать заметное влияние на характер движения протонов в плоскостном канале.

Потенциал переходной области ось-плоскость в виде разложения в тригонометрический ряд Фурье записывается следующим образом:

$$U_{sp}(x, t) = d^{-3} \cdot \sum_{n_x} \sum_{j=1}^8 V(g_x) \cdot \exp[-\sigma^2 g_x^2 / 2] \cdot \cos[2\pi n_x \cdot (x - x_j)] + V(g_{kl}) \cdot \exp[-\sigma^2 g_{kl}^2 / 2] \times \cos[2\pi \cdot [n_x \cdot (x - x_j) + t \phi_{kl} / \varepsilon - k \cdot y_j - l \cdot z_j]], \quad (1.28)$$

где: $V(g)$ – компонента Фурье потенциала изолированного атома;
 $g_x^2 = (2\pi \cdot n_x / a_x)^2$, $g_{kl}^2 = (2\pi)^2 \cdot [(n_x / a_x)^2 + (k / a_y)^2 + (l / a_z)^2]$ – квадрат вектора обратной решетки; a_x , a_y , a_z – периоды решетки по направлениям осей OX , OY , OZ ,
 x_j , y_j , z_j – координаты атомов элементарной ячейки в единицах постоянной решётки (таблица 1.1); $\Delta\theta$ – угол разориентации направления пучка частиц относительно кристаллографической оси;
 $\phi_{kl} = \sin(\theta_{kl} + \Delta\theta) \cdot k \cdot d / a_y + \cos(\theta_{kl} + \Delta\theta) \cdot l \cdot d / a_z$, $\theta_{kl} = -\arctg[(l \cdot a_y) / (k \cdot a_z)]$ – угол, определяющий направление кристаллографической оси $\langle 0kl \rangle$ в атомной плоскости.

1.7. Потери энергии

Проходя через вещество, быстрая заряженная частица за счёт кулоновского взаимодействия рассеивается на атомных электронах, передавая им часть своей энергии, которая расходуется в основном на ионизацию атомов. Поэтому такой процесс называют ионизационными потерями энергии. В настоящее время широко используется формула Бете-Блоха [34] для описания ионизационных потерь. В нашем случае, для описания скорости изменения полной энергии за счёт потерь энергии быстрыми ионами на электронах при плоскостном каналировании будем пользоваться формулой Бёте-Блоха с учё-

том правила равнораспределения Линдхарда и релятивистских поправок в кулоновском логарифме:

$$\frac{dE}{dt} = \frac{4\pi \cdot Z_1^2 \cdot (e^2)^2}{m_e c^2 \cdot \beta^2} \cdot L_e \cdot \rho'_e(x), \quad (1.29)$$

где: $L_e = \ln [2m_e c^2 \beta^2 / I] - \beta^2 - \delta/2$, $\rho'_e(x) = (\rho_e(x) + \rho_0) / 2$,

$\rho_0 = Z_2 \cdot 8 / d^3$ – среднее значение электронной плотности на 1 атом кристалла,

$\delta = 2 \cdot \ln[\hbar \omega_p \cdot \beta \cdot \gamma / I] - 1$ - поправка, связанная с эффектом плотности,

$\hbar \omega_p = [4\pi \cdot Z_2 \cdot N \cdot e^2 \cdot (\hbar c)^2 / m_e c^2]^{1/2}$ - плазменная частота (частота колебаний электронов в центре канала), $\hbar c = 1972.8$ эВ·Å.

1.8. Модели деканализирования

В ходе движения быстрых заряженных частиц в каналах кристалла возможно их рассеяние и выход из режима каналирования – это явление называется деканализированием. Рассеяние частиц может происходить из-за наличия в кристалле примесных атомов, дефектов кристаллической решётки и т.п. В данной работе кристалл считается идеальным, поэтому, деканализирование происходит только из-за многократного рассеяния каналированных частиц, которое имеет случайный характер. Рассчитываемые результаты деканализирования (выхода) частиц правильнее было бы называть “вероятностью деканализирования”. Например, частица, для которой, выполняются условия деканализирования, может и не выходить из канала. Частица может считаться деканализированной, если её угол больше критического угла каналирования, если она подходит близко к стенкам канала, если она имеет большие потери энергии. На этих условиях основаны следующие модели деканализирования:

1. Отбор деканализированных частиц по поперечным координатам (модель критического приближения):

Деканализирование рассматривается как процесс выхода частиц из каналов кристалла, вызванный смещением траекторий частиц к стенкам каналов, т.е. в область, где находятся узлы кристаллической решетки, и существует большая вероятность рассеяния движущихся частиц на атомах кристалла.

Расстояние наибольшего сближения движущейся частицы с границей канала связано с амплитудой тепловых колебаний атомов кристалла, и обычно определяется как амплитуда тепловых колебаний атомов кристалла (σ) от стенки канала. При этом процесс деканализирования для каждой отдельной движущейся частицы рассматривается как вероятностный, т.е. частицы не рассеиваются на атомах решетки, а переходят в соседние каналы и продолжают свое движение. Использование такой модели оправдано тем, что реальная вероятность рассеяния частицы очень мала. Однако мы считаем вероятность деканализирования равной 100%, но выбывания частицы не происходит. Т.е. мы получаем вероятность процесса деканализирования как время нахождения частицы близко к границе канала. Если сложить все вероятности деканализирования каждой отдельной частицы, то мы получим общую вероятность деканализирования пучка частиц, которую можно понимать как выход частиц.

2. Отбор по поперечным скоростям:

Поперечная скорость частицы связана с углом её направления в канале кристалла. Из теории каналирования известно, что частица может быть каналированной, если угол её направления в канале меньше критического угла каналирования Линдхарда Ψ_L . Таким образом, если угол частицы, при прохождении кристалла выходит за пределы $(-\Psi_L; \Psi_L)$, то такую частицу можно считать деканалированной.

3. Отбор по потерям энергии:

Отбор частиц по потерям энергии применяется в ряде экспериментов с целью выделения каналированных частиц. Для этой цели используют встроенные поверхностно-барьерные детекторы. Принцип отбора по потерям энергии следующий: т.к. вследствие движения в области низкой электронной плотности каналированные частицы имеют небольшие потери энергии, а неканалированные, т.е. движущиеся под большим углом к рядам атомов кристалла и пересекающие их теряют большую энергию, можно найти такую “критическую” энергию, которая разделяет каналированные и неканалированные частицы.

ГЛАВА 2. МОДЕЛИРОВАНИЕ ДВИЖЕНИЯ БЫСТРЫХ ЗАРЯЖЕННЫХ ЧАСТИЦ В КАНАЛАХ КРИСТАЛЛА

Метод компьютерного моделирования траекторий релятивистских заряженных частиц в кристаллах является наиболее гибким и детальным методом исследования явления каналирования. Особенности компьютерного эксперимента позволяют проследить характеристики движения частиц в любом месте кристалла, легко изменять условия эксперимента, что трудно выполнимо в реальных экспериментах. Возможность предсказания новых результатов, особенностей движения также является преимуществом компьютерного эксперимента. Следует отметить, что в настоящее время, в связи с развитием вычислительной техники методы компьютерного моделирования приобретают большую актуальность.

Моделирование траекторий релятивистских заряженных частиц в каналах кристаллов является сложной задачей, потому что при своём движении релятивистские частицы находятся в электрическом поле ядер атомов кристалла и их электронов, которые подвержены тепловым и квантовым флуктуациям; так же надо учитывать тот факт, что при движении через кристалл частица теряет часть своей энергии; кроме того, определённую трудность при моделировании представляет процесс многократного рассеяния. Если для решения первой проблемы можно воспользоваться малоугловым приближением и описывать взаимодействие частицы с атомами кристалла через усреднённые непрерывные потенциалы в соответствии с теорией Й.Линдхарда [2], то для описания многократного рассеяния приходится применять вероятностные методы. Вместе с тем, учёт многократного рассеяния в методе компьютерного моделирования особенно важен для более точного описания движения, т.к. позволяет учесть флуктуации, происходящие в любых реальных условиях. Для учёта многократного рассеяния в своё время были созданы модели, основанные на случайном смещении траекторий, т.е. на их переопределении или розыгрыше, так называемые "методы Монте-Карло".

2.1 Компьютерное моделирование процессов, связанных с каналированием

Первые компьютерные эксперименты, относящиеся к эффекту каналирования, были проведены в 1960-х годах. Собственно, само явление каналирования было открыто благодаря компьютерному моделированию [1]. С тех пор было разработано много компьютерных программ, моделирующих движение быстрых заряженных частиц в кристаллах. Наиболее известны следующие программы:

- BINCOL (1984г.) [35] – программа, основанная на модели парных столкновений частицы и атомов, согласно которой, для получения траектории частицы необходимо учитывать взаимодействия частицы с каждым атомом кристалла. Для описания электрического поля кристалла используется потенциал Линдхарда, также учитываются тепловые колебания атомов кристалла и не учитывается взаимодействие с электронами. Данная программа применялась для моделирования движения быстрых заряженных частиц в изогнутом кристалле.

- CATCH Capture And Transport of Charged particles in a crystal – (В.М. Бирюков, 1993г.) [36] – Монте-Карловская программа для моделирования эффектов каналирования в изогнутых кристаллах с учётом процессов рассеяния (однократных и многократных) на электронах и ядрах и потерь энергии. Используется приближение Мольера для потенциала взаимодействия. Для численного решения уравнения движения применяется алгоритм Верле.

- K2 – (Т.Тренклер и Ж.В.Жаннерет, 1994г.) – монте-карловская программа для моделирования рассеяния протонов, учитывающая многократное рассеяние, дифракцию, неупругие ядерные столкновения и потери энергии в аморфном материале.

- SRIM/TRIM The Stopping and Range of Ions in Solids – (J. F. Ziegler, J. P. Biersack и U. Littmark, 1985-2003гг.) [37] – программа для расчёта длин пробега и потерь энергии движущимися ионами в веществе (неупорядоченной

среде).

- Программа K.Saitoh [15].

- Программа А.М.Таратина [10].

Предложенные в своё время различные модели компьютерного эксперимента, имеют определённые преимущества и недостатки. Например, модель бинарных соударений, в которой траектория частицы формируется в результате взаимодействия с каждым атомом кристалла на пути движения частицы наиболее детально описывает движение, но из-за больших затрат компьютерного времени не позволяет рассматривать кристаллы больших размеров. Для увеличения скорости расчётов обычно используют методы группировки столкновений, например модель отрезков. В модели отрезков путь частицы разбивается на отрезки определённой длины. Изменение состояния частицы в конце отрезка определяется многократным рассеянием [10]. Для учёта обратного влияния многократного рассеяния на траектории каналированных ионов обычно применяют вероятностный метод Монте-Карло. В работе [15] предлагается теоретическая модель описания плоскостных колебаний, основанная на методе Монте-Карло с розыгрышем траекторий по поперечной скорости.

В нашей работе предлагается новый подход к учёту многократного рассеяния в методе компьютерного моделирования траекторий каналированных частиц в плоскостных каналах кристалла. Суть нашего подхода состоит в том, что розыгрыш производится по поперечным координате и скорости с помощью случайной величины, распределённой по нормальному закону, зависящей от флуктуаций поперечной координаты и угла, соответственно; кроме того, учитывается влияние потенциала на эволюцию средних квадратов флуктуаций поперечных координаты и скорости частицы, что приводит к уменьшению скорости деканализации в случае положительных частиц и более точному сходству с экспериментальными данными.

На основе модели движения, реализующей указанный выше подход к описанию многократного рассеяния, была разработана компьютерная про-

грамма моделирования траекторий быстрых заряженных частиц в каналах алмазоподобных кристаллов, названная PST (the Phase Space of Transversal coordinates and velocities), т.к. моделирование производится в фазовом пространстве поперечных координат и скоростей.

Применяемый для расчёта траекторий численный метод основан на численном методе решения системы дифференциальных уравнений Рунге-Кутты 4 порядка. Программа PST позволяет вести расчёт для трёх плоскостных направлений (100), (110) и (111) кристаллов кремния, германия и алмаза для положительно и отрицательно заряженных частиц (протоны, ионы, тяжёлые отрицательно заряженные частицы), для аппроксимаций Мольер и Дойля-Тёрнера потенциала изолированного атома и электронной плотности. С помощью программы PST можно получить следующие результаты: траектории, фазовые траектории, угловые и пространственные распределения для любого сечения кристалла, спектры потерь энергии на электронах, вероятности деканалирования (выходы частиц) и ориентационные зависимости.

2.2 Модель движения релятивистских заряженных частиц в каналах кристалла

Движение быстрых заряженных частиц в кристаллах является стохастическим процессом, так как тепловые колебания атомов кристалла и квантовые флуктуации, которые испытывают атомные электроны, изменяют случайным образом значение поперечной силы, приводящей к малоугловому рассеянию. Известно, что стохастические процессы могут быть описаны с помощью метода кинетических уравнений движения, метода интегрирования в функциональных пространствах и метода ланжевеновских (стохастических) уравнений движения. Преимущественное развитие теории эффекта каналирования происходило в рамках метода кинетических уравнений движения, описывающих эволюцию плотности потока каналированных частиц как в фазовом пространстве поперечных координат и скоростей, так и в пространстве поперечных энергий [24,31,38,39]. Ланжевеновский подход к теории канали-

рования был развит в работе [29]. Известно, что решения линеаризованных стохастических и кинетических уравнений совпадают между собой.

Такие решения описывают процесс каналирования в тонких кристаллах. Чтобы получить решение по всей длине некоторого кристалла поступают следующим образом. Кристалл разбивается на стопку тонких кристаллов (отрезков). При этом нелинейное стохастическое уравнение движения может быть линеаризовано в каждом из тонких кристаллов. С помощью линеаризованного стохастического уравнения движения учитывается влияние динамики изменения средних значений динамических величин на эволюцию флуктуаций относительно этих средних. Обратное влияние флуктуаций на динамику изменения средних значений динамических величин учитывается с помощью свертки функции распределения при переходе от одного тонкого кристалла к другому.

В методе компьютерного моделирования траекторий это означает, что при переходе от одного тонкого кристалла к другому значения поперечной координаты и скорости разыгрываются с помощью функции распределения флуктуаций поперечной координаты и скорости относительно своих средних значений. Система уравнений для моментов функции распределения строится с помощью системы линеаризованных стохастических уравнений. При переходе от одного тонкого кристалла к другому следует переопределять не только значения поперечной координаты и скорости, но и полную энергию частиц. Необходимо отметить, что указанный метод имеет следующий недостаток: средний квадрат флуктуаций поперечной скорости, являющийся в данном методе единственной характеристикой процесса рассеяния каналированных частиц на флуктуациях потенциала, вводится эмпирически [10,15,36].

Предлагаемый в нашей работе метод учёта многократного рассеяния при компьютерном моделировании траекторий каналированных частиц в плоскостных каналах кристалла основан на использовании уравнений эволюции средних квадратов флуктуаций динамических величин (поперечная

координата, скорость), которые были построены исходя из микроскопических уравнений движения [29].

Модель PST основана на решении системы уравнений, описывающей движение быстрых частиц в каждом из тонких кристаллов, которая имеет вид [29]:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d}{dt} x = \dot{x}, \quad \frac{d}{dt} \dot{x} = -\frac{\partial U(x)}{\partial x} \\ \frac{d}{dt} \overline{\delta x^2} = 2 \overline{\delta x \delta \dot{x}} \\ \frac{d}{dt} \overline{\delta x \delta \dot{x}} = \overline{\delta \dot{x}^2} - \frac{1}{m} \frac{\partial^2 U(x)}{\partial x^2} \cdot \overline{\delta x^2} \\ \frac{d}{dt} \overline{\delta \dot{x}^2} = -\frac{2}{m} \frac{\partial^2 U(x)}{\partial x^2} \cdot \overline{\delta x \delta \dot{x}} + \frac{D(x)}{m^2} \end{array} \right. \quad (2.1)$$

где: $m = \gamma \cdot m_0$ – релятивистская масса быстрой частицы, $\gamma = (1 - \beta^2)^{-1/2}$ – Лоренц-фактор, $\beta = v/c$, c – скорость света, v – скорость частицы; в качестве $U(x)$ можно использовать потенциал плоскостного канала (1.1) или переходной области ось-плоскость (1.28); Коэффициент диффузии $D(x) = D_{el}(x) + D_{nuc}(x)$ состоит из двух слагаемых: $D_{el}(x)$ – электронный коэффициент диффузии (1.4), и $D_{nuc}(x)$ – ядерный коэффициент диффузии (1.5).

Многократное рассеяние определяется с помощью розыгрыша значений поперечной координаты и скорости (угла) частицы. Розыгрыш состоит в одновременном переопределении поперечной координаты и скорости частицы и обнулении вторых моментов на данном шаге решения, что и соответствует рассеянию частицы. Условиями розыгрыша являются условия малости флуктуаций, т.е. розыгрыш производится при превышении пороговых значений вторых моментов $\overline{\delta x^2}_{\max}$ или $\overline{\delta \dot{x}^2}_{\max}$. Розыгрыш запрещается, если после предыдущего розыгрыша пройдено расстояние, меньшее T_{\min} , которое определяется минимальным количеством столкновений частицы с атомами кристалла, после которого возможно рассеяние (в расчётах T_{\min} бралось порядка длины одного шага решения, но большим 60 Å).

Переопределение значений поперечных координаты и скорости производится случайным образом, т.е. “новое” значение находится из гауссовского

распределения со следующими параметрами: среднее значение соответствует “старому” значению координаты или скорости, а среднеквадратичное отклонение равно соответственно $\sqrt{\delta x^2}$ или $\sqrt{\delta \dot{x}^2}$.

2.3 Компьютерная реализация модели PST

На основе теоретической модели движения релятивистских заряженных частиц в каналах кристалла была создана компьютерная программа расчёта характеристик движения частиц. В рамках созданной программы PST также возможно вести расчёт траекторий без учёта многократного рассеяния (версия “XV”) и по “стандартной” модели многократного рассеяния (версия “SM”). Название “стандартной” модели связано с тем, что в ней реализуется способ описания многократного рассеяния, подобный используемым в настоящее время в существующих компьютерных программах [10, 15].

2.3.1 Версии XV и SM

В версии XV траектория каналированной частицы получается при решении следующей системы уравнений:

$$\begin{cases} \frac{d}{dt} x = \dot{x} \\ \frac{d}{dt} \dot{x} = -\frac{\partial U(x)}{\partial x} \end{cases} \quad (2.2)$$

Отличие стандартной модели от модели PST состоит в том, что в системе уравнений движения (2.1) положено $\partial^2 U(x) / \partial x^2 = 0$. Многократное рассеяние в версии SM учитывается в рамках стандартной модели, согласно которой скорость приращения среднего квадрата угла многократного рассеяния на единицу длины пути пропорциональна плотности распределения атомных электронов и ядер в той точке пространства, где находится каналированная частица. Таким образом, для получения траектории каналированной частицы в версии SM решается следующая система уравнений:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d}{dt} x = \dot{x}, \quad \frac{d}{dt} \dot{x} = -\frac{\partial U(x)}{\partial x} \\ \frac{d}{dt} \overline{\delta x^2} = 2 \overline{\delta x \delta \dot{x}} \\ \frac{d}{dt} \overline{\delta x \delta \dot{x}} = \overline{\delta \dot{x}^2} \\ \frac{d}{dt} \overline{\delta \dot{x}^2} = \frac{D(x)}{m^2}. \end{array} \right. \quad (2.3)$$

2.3.2 Обезразмеривание параметров движения

Так как для описания движения частиц в кристалле применяется численное решение системы дифференциальных уравнений, а реальные значения параметров движения могут различаться на несколько порядков, для обеспечения корректной работы численного метода необходимо обезразмерить параметры движения таким образом чтобы характерные интервалы изменения динамических переменных были порядка единицы.

Обезразмеривание состоит в приведение длин к постоянной решётки d кристалла, т.е.

$T = T_1 / d$ – безразмерная глубина, на которую проникает частица за время t .

В свою очередь, T_1 определяется как $T_1 = \varepsilon \cdot \tau$, где $\tau = v \cdot t$, $\varepsilon^2 = V_{\max} / m v^2 = V_{\max} / p v$ (см. п.1.5); таким образом, $T = \varepsilon \cdot v \cdot t / d$.

$X = x / d$, $\sigma' = \sigma / d$, $a' = a / d$ – безразмерные поперечная координата, средняя амплитуда тепловых колебаний атомов кристалла и радиус экранирования Томаса-Ферми, соответственно.

С учётом обезразмеривания непрерывный плоскостной потенциал запишется следующим образом:

$$U(X) = d^{-3} \cdot \sum_{n_x} \sum_{j=1}^8 V(g_x) \cdot \exp[-\sigma'^2 g_x^2 / 2] \cdot \cos[2\pi \cdot n_x \cdot (X - x_j \cdot d / a_x)], \quad (2.4)$$

а потенциал переходной области ось-плоскость примет вид:

$$\begin{aligned}
U_{sp}(X, T) = & d^{-3} \sum_{n_x} \sum_{j=1}^8 V(g_x) \cdot \exp[-\sigma'^2 g_x^2 / 2] \cdot \cos[2\pi \cdot n_x (X - x_j \cdot d/a_x)] + \\
& + V(g_{kl}) \cdot \exp[-\sigma'^2 g_{kl}^2 / 2] \times \\
& \times \cos[2\pi \cdot [n_x (X - x_j \cdot d/a_x) + T \cdot \phi_{kl} / \varepsilon - k \cdot y_j \cdot d/a_y - l \cdot z_j \cdot d/a_z]],
\end{aligned} \tag{2.5}$$

где x_j, y_j, z_j – координаты атомов элементарной ячейки кристалла в единицах a_x, a_y, a_z , соответственно (таблица 1.2);

$g_x^2 = (2\pi \cdot n_x / a_x)^2$, $g_{kl}^2 = (2\pi)^2 \cdot [(n_x / a_x)^2 + (k/a_y)^2 + (l/a_z)^2]$ – квадрат вектора обратной решетки; $\phi_{kl} = \sin(\theta_{kl} + \Delta\theta) \cdot k \cdot d/a_y + \cos(\theta_{kl} + \Delta\theta) \cdot l \cdot d/a_z$,

$\theta_{kl} = -\arctg[(l \cdot a_y)/(k \cdot a_z)]$ – угол, определяющий направление кристаллографической оси $\langle 0kl \rangle$ в атомной плоскости.

Формулы для электронной и ядерной плотностей в этом случае запишутся:

$$\rho_{nucl}(X) = d^{-3} \cdot \sum_{n_x} \sum_{j=1}^8 \exp[-\sigma'^2 g_x^2 / 2] \cdot \cos[2\pi n_x \cdot (X - x_j \cdot d/a_x)], \tag{2.6}$$

$$\rho_{el}(X) = d^{-3} \cdot \sum_{n_x} \sum_{j=1}^8 F(g_x^2) \cdot \exp[-\sigma'^2 g_x^2 / 2] \cdot \cos[2\pi n_x \cdot (X - x_j \cdot d/a_x)]. \tag{2.7}$$

Определим поперечную скорость в безразмерных переменных:

$$V_x \equiv \dot{x} = \frac{dx}{dt} = \frac{dx}{d(\tau/\nu)} = \nu \frac{dx}{d\tau} \cdot \frac{\varepsilon}{\varepsilon} = \nu \cdot \varepsilon \cdot \frac{dx}{dT_1} = \nu \cdot \varepsilon \cdot \frac{d(X \cdot d)}{d(T \cdot d)} = \nu \cdot \varepsilon \cdot \frac{dX}{dT}.$$

Запишем уравнения на вторые моменты в безразмерных переменных.

Определим безразмерные флуктуации:

$$x = X \cdot d \rightarrow \delta x = \eta \cdot d,$$

$$\dot{x} = \frac{dX}{dT} \cdot \nu \cdot \varepsilon \rightarrow \delta \dot{x} = \dot{\eta} \cdot \varepsilon \cdot \nu,$$

$$\delta x \cdot \delta \dot{x} = (\eta \cdot d) \cdot (\dot{\eta} \cdot \varepsilon \cdot \nu) = \eta \dot{\eta} \cdot d \cdot \varepsilon \cdot \nu.$$

Подставим полученные выражения для флуктуаций в уравнения на вторые моменты:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\overline{\eta^2 \cdot d^2}) = 2 \cdot (d \cdot \varepsilon \cdot \nu \cdot \overline{\eta \dot{\eta}});$$

$$m \frac{\partial}{\partial t} (\overline{\eta \dot{\eta} \cdot d \cdot \varepsilon \cdot \nu}) = m \cdot (\overline{\dot{\eta}^2 \cdot \varepsilon^2 \cdot \nu^2}) - \frac{\partial^2 U(X)}{\partial X^2} \cdot (\overline{\eta^2 \cdot d^2});$$

$$m \frac{\partial}{\partial t} (\overline{\dot{\eta}^2} \cdot \varepsilon^2 \cdot v^2) = -2 \cdot \frac{\partial^2 U(X)}{\partial X^2} \cdot (\overline{\eta \dot{\eta}} \cdot d \cdot \varepsilon \cdot v) + \frac{1}{m} \cdot D(X).$$

Перейдём к производным по безразмерной длине:

$$\text{т.к. } t = T \cdot d / (\varepsilon \cdot v), \text{ то } \frac{\partial}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial (T \cdot d / (\varepsilon \cdot v))} = \frac{\partial}{\partial T} \cdot \frac{\varepsilon \cdot v}{d};$$

Уравнение для среднего квадрата флуктуаций по поперечной координате запишется:

$$\frac{\partial \overline{\eta^2}}{\partial T} = 2 \cdot \overline{\eta \dot{\eta}}.$$

Получим уравнение для смешанного момента:

$$m \cdot \frac{\partial \overline{\eta \dot{\eta}}}{\partial T} = m \cdot \overline{\dot{\eta}^2} - \frac{\overline{\eta^2}}{\varepsilon^2 \cdot v^2} \cdot \frac{\partial^2 U(X)}{\partial X^2};$$

$$\frac{\partial \overline{\eta \dot{\eta}}}{\partial T} = \overline{\dot{\eta}^2} - \frac{\overline{\eta^2}}{\varepsilon^2 \cdot p v} \cdot \frac{\partial^2 U(X)}{\partial X^2} = \overline{\dot{\eta}^2} - \frac{\overline{\eta^2}}{V_{\max}} \cdot \frac{\partial^2 U(X)}{\partial X^2}.$$

Получим уравнение для среднего квадрата флуктуаций по поперечной скорости:

$$\frac{\partial \overline{\dot{\eta}^2}}{\partial T} = -\frac{2 \cdot \overline{\eta \dot{\eta}}}{V_{\max}} \cdot \frac{\partial^2 U(X)}{\partial X^2} + \frac{2 \cdot d}{\varepsilon^3 \cdot v^3 \cdot m^2} \cdot D(X),$$

Слагаемое с коэффициентом диффузии можно переписать:

$$\frac{2 \cdot d \cdot D(X)}{\varepsilon^3 \cdot v^3 \cdot m^2} = \frac{2 \cdot d \cdot D(X)}{\varepsilon^3 \cdot p^2 \cdot v^2 \cdot m^2} \cdot v \cdot \frac{\varepsilon}{\varepsilon} \cdot \frac{d}{d} = \frac{2 \cdot D(X)}{V_{\max}^2} \cdot \frac{\varepsilon \cdot v}{d} \cdot d^2 = \frac{2 \cdot D(X)}{V_{\max}^2} \cdot \varepsilon \cdot v \cdot d,$$

$$\text{тогда } \frac{\partial \overline{\dot{\eta}^2}}{\partial T} = -\frac{2 \cdot \overline{\eta \dot{\eta}}}{V_{\max}} \cdot \frac{\partial^2 U(X)}{\partial X^2} + \frac{2 \cdot d}{\varepsilon^3 \cdot v^3 \cdot m^2} \cdot D(X) =$$

$$= -\frac{2 \cdot \overline{\eta \dot{\eta}}}{V_{\max}} \cdot \frac{\partial^2 U(X)}{\partial X^2} + \frac{2 \cdot D(X)}{V_{\max}^2} \cdot \varepsilon \cdot v \cdot d.$$

Для удобства безразмерные вторые моменты обозначим:

$$MA = \overline{\partial \eta^2}, \quad MB = \overline{\partial \eta \dot{\eta}}, \quad MC = \overline{\partial \dot{\eta}^2}.$$

Теперь можно записать систему уравнений движения, составляющих модель PST с учётом безразмеривания переменных:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d}{dT} V_x = -\frac{1}{V_{\max}} \frac{\partial U(X)}{\partial X}; \quad \frac{d}{dT} X = V_x; \\ \frac{d}{dT} MA = 2 \cdot MB; \\ \frac{d}{dT} MB = MC - \frac{1}{V_{\max}} \frac{\partial^2 U(X)}{\partial X^2} \cdot MA; \\ \frac{d}{dT} MC = \frac{\varepsilon \cdot d}{V_{\max}^2} \cdot D(X) - \frac{2}{V_{\max}} \frac{\partial^2 U(X)}{\partial X^2} \cdot MB. \end{array} \right. \quad (2.8)$$

2.3.3 Описание программы

Программа PST написана на языке Object Pascal в программной среде Borland Delphi и состоит из следующих модулей:

- Модуль задания начальных условий и параметров решения (см. рис. 2.1);
- Решатель траекторий;
- Модуль расчёта потерь энергии (см. рис. 2.8);
- Модуль графического представления результатов расчётов (см. рис. 2.4).

2.3.3.1 Модуль задания начальных условий и параметров решения

В качестве начальных условий можно задавать: характеристики кристалла: кристалл (кремний, германий или алмаз, плоскостное направление (100), (110) или (111); характеристики частицы: полная начальная энергия, масса (в атомных единицах массы), заряд, диапазон точек и углов влёта частиц, а также вид функции распределения по углам влёта (нормальное или равномерное распределение); параметры решения: количество членов разложения в ряд Фурье для потенциала и коэффициента диффузии, длина рассматриваемого слоя кристалла, количество шагов (или “узлов”) решения для заданной длины слоя кристалла, а также условия розыгрыша (многократного рассеяния).

Значение параметра ε определяется по заданным значениям следующим образом: $\varepsilon = \sqrt{V_{\max} / \left(E + M_1 m_0 c^2 / \left(1 + M_1 m_0 c^2 / E \right) \right)}$, где $m_0 c^2 \approx 931$ эВ – энергия, эквивалентная массе покоя нуклона.

2.3.3.2 Решатель траекторий

В модуле расчёта траекторий описывается процесс пошагового расчёта значений параметров движения частицы. Рассчитываемые параметры движения это поперечная координата и угол частицы, а также значения вторых моментов функции распределения на некотором шаге решения (шаг “узел” решения соответствует глубине). Расчёт параметров движения основан на методе численного решения системы дифференциальных уравнений Рунге-Кутты 4 порядка. Выбор метода Рунге-Кутты связан с тем, что этот метод часто применяется при моделировании физических процессов и имеет относительно небольшую погрешность, однако, расчёт этим методом занимает в несколько раз ($2\div 4$) больше времени, чем, например, методом Эйлера.

Метод Рунге-Кутты позволяет вычислить значения параметров системы дифференциальных уравнений на некотором шаге (глубине), зная значения этих параметров на предыдущем шаге. При этом решение производится по следующей схеме (для системы из двух дифференциальных уравнений):

$$\begin{cases} \frac{dy}{dt} = f(t, y(t), x(t)) \\ \frac{dx}{dt} = g(t, y(t), x(t)) \end{cases}$$

Значения функций на каждом шаге находятся по формулам:

$$y_{n+1} = y_n + h \cdot (k_1 + 2 \cdot k_2 + 2 \cdot k_3 + k_4) / 6$$

$$x_{n+1} = x_n + h \cdot (q_1 + 2 \cdot q_2 + 2 \cdot q_3 + q_4) / 6$$

$$t_{n+1} = t_n + h,$$

где: h – шаг решения,

k_i, q_i - коэффициенты Ренге-Кутты:

$$k_1 = f(t_n, y_n, x_n),$$

$$q_1 = g(t_n, y_n, x_n),$$

$$k_2 = f(t_n + h/2, y_n + k_1 \cdot h/2, x_n + q_1 \cdot h/2), \quad q_2 = g(t_n + h/2, y_n + k_1 \cdot h/2, x_n + q_1 \cdot h/2),$$

$$k_3 = f(t_n + h/2, y_n + k_2 \cdot h/2, x_n + q_2 \cdot h/2), \quad q_3 = g(t_n + h/2, y_n + k_2 \cdot h/2, x_n + q_2 \cdot h/2),$$

$$k_4 = f(t_{n+1}, y_n + k_3 \cdot h, x_n + q_3 \cdot h), \quad q_4 = g(t_{n+1}, y_n + k_3 \cdot h, x_n + q_3 \cdot h).$$

Рассмотрим применение метода Рунге-Кутты для решения системы уравнений (2.8). В этом случае в системе из пяти дифференциальных уравнений первого порядка взаимосвязанными являются только два (уравнения на X и V_x); остальные три дифференциальных уравнения (уравнения на вторые моменты) решаются с использованием полученных для данного узла решения значений X и V_x , и в тоже время не оказывают прямого обратного влияния на уравнения для X и V_x . Влияние значений вторых моментов на траектории (чем и описывается влияние многократного рассеяния), определяется с помощью розыгрыша, только при выполнении условий многократного рассеяния. Розыгрыш производится с применением нормального случайного распределения: “новое” значение X или V_x выбирается случайным образом из нормального распределения со средним значением, равным “старому” значению X или V_x и среднеквадратичным отклонением, равным соответствующему второму моменту MA или MC . Причём, в зависимости от условий многократного рассеяния розыгрыш по X или V_x может выполняться как совместно, при превышении одним из вторых моментов MA или MC критического значения, так и отдельно – только по x или только по V_x .

Правые части каждого из уравнений заменим соответствующими функциями:

$$RV_x(T, V_x, X) = -\frac{1}{V_{\max}} \frac{\partial U(X)}{\partial X};$$

$$Rx(T, V_x, X) = V_x;$$

$$RMA(MA, MB, MC, X, T) = 2 \cdot MB;$$

$$RMB(MA, MB, MC, X, T) = MC - \frac{1}{V_{\max}} \frac{\partial^2 U(X)}{\partial X^2} \cdot MA;$$

$$RMC(MA, MB, MC, X, T) = \frac{\varepsilon \cdot d}{V_{\max}^2} \cdot D(X) - \frac{2}{V_{\max}} \frac{\partial^2 U(X)}{\partial X^2} \cdot MB.$$

Можно видеть, что первые два уравнения не зависят напрямую от решений уравнений на вторые моменты, зато вторые моменты связаны между

собой и зависят от значения x , получаемого из решения первых двух уравнений.

Для решения сначала определяются начальные условия: начальная глубина T_{start} , конечная глубина T_{depth} , начальные поперечные координаты X_{start} и углы $V_{x \text{ start}}$, количество шагов (узлов) решения, начальные значения вторых моментов. Исходя из начальных условий, рассчитывается величина шага по глубине $h = (T_{\text{depth}} - T_{\text{start}}) / (n-1)$.

Вся глубина рассматриваемого слоя кристалла разбивается на отрезки (узлы решения) с шагом h . Расчёт траекторий выполняется пошагово для каждой частицы. Рассмотрим решение на одном шаге для одной траектории.

Значения параметров движения на шаге $n+1$ находятся по уже найденным параметрам для предыдущего шага по формулам:

$$T_{n+1} = T_n + h,$$

$$V_{x \ n+1} = V_{x \ n} + h \cdot (k_{Vx \ 1} + 2 \cdot k_{Vx \ 2} + 2 \cdot k_{Vx \ 3} + k_{Vx \ 4}) / 6$$

$$X_{n+1} = X_n + h \cdot (k_{x \ 1} + 2 \cdot k_{x \ 2} + 2 \cdot k_{x \ 3} + k_{x \ 4}) / 6$$

$$MA_{n+1} = MA_n + h \cdot (k_{MA \ 1} + 2 \cdot k_{MA \ 2} + 2 \cdot k_{MA \ 3} + k_{MA \ 4}) / 6$$

$$MB_{n+1} = MB_n + h \cdot (k_{MB \ 1} + 2 \cdot k_{MB \ 2} + 2 \cdot k_{MB \ 3} + k_{MB \ 4}) / 6$$

$$MC_{n+1} = MC_n + h \cdot (k_{MC \ 1} + 2 \cdot k_{MC \ 2} + 2 \cdot k_{MC \ 3} + k_{MC \ 4}) / 6$$

Коэффициенты k определяются следующим образом:

$$k_{Vx \ 1} = RV_x (T_n, V_{x \ n}, X_n),$$

$$k_{Vx \ 2} = RV_x (T_n + h/2, V_{x \ n} + k_{Vx \ 1} \cdot h/2, X_n + k_{x1} \cdot h/2),$$

$$k_{Vx \ 3} = RV_x (T_n + h/2, V_{x \ n} + k_{Vx \ 2} \cdot h/2, X_n + k_{x2} \cdot h/2),$$

$$k_{Vx \ 4} = RV_x (T_{n+1}, V_{x \ n} + k_{Vx \ 3} \cdot h, X_n + k_{x3} \cdot h);$$

$$k_{x1} = Rx (T_n, V_{x \ n}, X_n),$$

$$k_{x2} = Rx (T_n + h/2, V_{x \ n} + k_{Vx \ 1} \cdot h/2, X_n + k_{x1} \cdot h/2),$$

$$k_{x3} = Rx (T_n + h/2, V_{x \ n} + k_{Vx \ 2} \cdot h/2, X_n + k_{x2} \cdot h/2),$$

$$k_{x4} = Rx (T_{n+1}, V_{x \ n} + k_{Vx \ 3} \cdot h, X_n + k_{x3} \cdot h);$$

$$k_{MA1} = RMA (MA_n, MB_n, MC_n, X_n, T_n),$$

$$k_{MA2} = RMA (MA_n + k_{MA1} \cdot h/2, MB_n + k_{MB1} \cdot h/2, MC_n + k_{MC1} \cdot h/2,$$

$$X_n + k_{x1} \cdot h/2, T_n + h/2),$$

$$\begin{aligned}
k_{MA3} &= RMA (MA_n + k_{MA2} \cdot h/2, MB_n + k_{MB2} \cdot h/2, MC_n + k_{MC2} \cdot h/2, \\
&\quad X_n + k_{x2} \cdot h/2, T_n + h/2), \\
k_{MA4} &= RMA (MA_n + k_{MA3} \cdot h, MB_n + k_{MB3} \cdot h, MC_n + k_{MC3} \cdot h, X_n + k_{x3} \cdot h, T_{n+1}); \\
k_{MB1} &= RMB (MA_n, MB_n, MC_n, X_n, T_n), \\
k_{MB2} &= RMB (MA_n + k_{MA1} \cdot h/2, MB_n + k_{MB1} \cdot h/2, MC_n + k_{MC1} \cdot h/2, \\
&\quad X_n + k_{x1} \cdot h/2, T_n + h/2), \\
k_{MB3} &= RMB (MA_n + k_{MA2} \cdot h/2, MB_n + k_{MB2} \cdot h/2, MC_n + k_{MC2} \cdot h/2, \\
&\quad X_n + k_{x2} \cdot h/2, T_n + h/2), \\
k_{MB4} &= RMB (MA_n + k_{MA3} \cdot h, MB_n + k_{MB3} \cdot h, MC_n + k_{MC3} \cdot h, x_n + k_{x3} \cdot h, t_{n+1}); \\
k_{MC1} &= RMC (MA_n, MB_n, MC_n, X_n, T_n), \\
k_{MC2} &= RMC (MA_n + k_{MA1} \cdot h/2, MB_n + k_{MB1} \cdot h/2, MC_n + k_{MC1} \cdot h/2, \\
&\quad X_n + k_{x1} \cdot h/2, T_n + h/2), \\
k_{MC3} &= RMC (MA_n + k_{MA2} \cdot h/2, MB_n + k_{MB2} \cdot h/2, MC_n + k_{MC2} \cdot h/2, \\
&\quad X_n + k_{x2} \cdot h/2, T_n + h/2), \\
k_{MC4} &= RMC (MA_n + k_{MA3} \cdot h, MB_n + k_{MB3} \cdot h, MC_n + k_{MC3} \cdot h, X_n + k_{x3} \cdot h, T_{n+1}).
\end{aligned}$$

Затем, проверяются условия розыгрыша (многократного рассеяния): если после предыдущего розыгрыша пройдено расстояние T_{\min} , а также значение хотя бы одного из вторых моментов превышает критическое, производится переопределение значений поперечной координаты и угла, а значения вторых моментов обнуляются. Переопределение значений координаты и угла производится с помощью функции RandG (возвращает случайное число из нормального распределения; задаются параметры: среднее значение, средне-квадратичное отклонение), входящей в набор математических функций Delphi. Программно это записывается следующим образом:

$$\begin{aligned}
V_{x\ n+1} &:= \text{RandG}(V_{x\ n}, \sqrt{|MC_n|}); \\
X_{n+1} &:= \text{RandG}(X_n, \sqrt{|MA_n|}); \\
MA_{n+1} &:= 0; \quad MB_{n+1} := 0; \quad MC_{n+1} := 0.
\end{aligned}$$

В программе имеется возможность производить розыгрыш отдельно для X в случае достижения критического значения вторым моментом MA , и отдельно по V_x при достижении критического значения моментом MC . Так

же можно установить значение глубины, пройденной от предыдущего розыгрыша T_{\max} , на которой производится розыгрыш, даже если вторые моменты не достигли своих критических значений.

2.3.3.3 Модуль расчёта потерь энергии

Потери энергии определяются с помощью численного интегрирования уравнения (1.29). Для численного интегрирования применяется метод трапеций. При этом находятся значения потерь энергии на каждом шаге для каждой траектории. Также можно рассчитать потери энергии, отнесённые к пройденной длине или к единице длины. Так называемые, удельные потери энергии применяются для расчётов деканализирования методом отбора по потерям энергии.

Потери энергии на единицу длины dE/dz находятся следующим образом:

1. Задаётся длина "подслоя" dz в ангстремах и вся длина рассматриваемого слоя кристалла делится на подслои с шагом dz .
2. Находятся значения потерь энергии dE в начале (dE_1) и в конце (dE_2) каждого подслоя.
3. Определяются потери энергии на единицу длины для каждого подслоя, как разность значений $dE_2 - dE_1$, делённая на длину подслоя dz .

2.3.3.4 Реализация методов расчёта деканализирования

Метод отбора деканализированных частиц по потерям энергии аналогичен применённому на практике в ряде экспериментов методу, когда детекторы были встроены в сам кристалл. В этом случае рассматривается спектр потерь энергии на единицу длины dE/dz , в нашем случае это гистограмма результатов расчёта удельных потерь энергии. В структуре такого спектра можно выделить два пика – первый в области относительно небольших потерь энергии связан с каналированными положительно заряженными частицами, второй при более высоких потерях энергии связан с неканализованными частицами. В связи с чем, можно выбрать критическое значение потерь энергии,

разделяющее каналированные и неканалированные частицы. Сравнения полученных в ходе компьютерного моделирования по модели PST спектров потерь энергии со значениями потерь энергии в неупорядоченной среде по программе SRIM [37] показывают, что критическое значение потерь энергии надо принимать равным 0.95 от значения dE/dz для второго пика.

Метод отбора деканалированных частиц по поперечным скоростям организован простой проверкой значений поперечных скоростей для каждой частицы на некотором шаге решения, соответствующей заданной глубине.

В случае учёта деканалирования по критическому приближению частицы к стенке канала для того, чтобы определить вероятность деканалирования частицы проверяется её поперечная координата. В случае приближения частицы к стенке канала на расстояние, меньшее критического вероятность её деканалирования принимается равной 1, в остальных случаях – 0.

Программно указанная проверка осуществлена следующим образом. Т.к. в ходе обезразмеривания длины приводились к постоянной решётки кристалла, периодичность плоскостных каналов оказалась кратной a_x . Например, в интервале $0 \leq x / a_x \leq 1$ располагаются 4 плоскостных канала (100), 2 плоскостных канала (110) или 1 плоскостной канал (111), состоящий из широкого ($0 \leq x / a_x \leq 0.75$) и узкого ($0.75 \leq x / a_x \leq 1$) каналов. Поперечные координаты частиц могут принимать большие значения, особенно в случаях длинных кристаллов. Используя тот факт, что дробная часть любых значений заключена в $0 \leq x / a_x \leq 1$, достаточно описать интервалы деканалирования в пределах $0 \leq a_x \leq 1$.

Так для плоскостного направления (100) интервалы деканалирования будут: $x / a_x \leq \sigma / a_x$, $0.25 - \sigma / a_x \leq x / a_x \leq 0.25 + \sigma / a_x$, $0.5 - \sigma / a_x \leq x / a_x \leq 0.5 + \sigma / a_x$, $0.75 - \sigma / a_x \leq x / a_x \leq 0.75 + \sigma / a_x$, $x / a_x \geq 1 - \sigma / a_x$.

Интервалы деканалирования для плоскостного направления (110):

$x / a_x \leq \sigma / a_x$, $0.5 - \sigma / a_x \leq x / a_x \leq 0.5 + \sigma / a_x$, $x / a_x \geq 1 - \sigma / a_x$.

Интервалы деканалирования для плоскостного направления (111):

$x / a_x \leq \sigma / a_x$, $0.75 - \sigma / a_x \leq x / a_x \leq 0.75 + \sigma / a_x$, $x / a_x \geq 1 - \sigma / a_x$.

Значения a_x различаются для различных плоскостных направлений.

2.4 Алгоритм работы с программой

Работу с программой можно описать следующим алгоритмом. Задаются начальные условия: кристалл, плоскостной канал, глубина рассматриваемого участка, характеристики частицы: масса, заряд, полная энергия (см. рис. 2.1), начальные угловые и пространственные распределения частиц в канале (рис. 2.2), параметры многократного рассеяния (рис. 2.3). Также задаются: приближение Мольтера или Дойля-Тёрнера, количество членов в разложении Фурье, число узлов решения. После чего, запускается расчёт траекторий, при котором рассчитываются значения поперечной координаты и скорости, а также значения вторых моментов функции распределения для каждого шага решения. По полученным результатам можно просмотреть графики траекторий (рис. 2.4), пространственные и угловые распределения частиц на любой глубине в кристалле (рис. 2.5), построить график вероятности деканализации по модели критического приближения (рис. 2.6) и ориентационную зависимость (рис. 2.7). Если по условиям задачи требуется рассчитать потери энергии, то после расчёта траекторий выбираются условия расчёта потерь энергии: учёт релятивистских поправок, правила равномерного распределения и рассчитываются потери энергии (рис. 2.8). Далее можно построить спектр потерь энергии, график выхода частиц по потерям энергии (рис. 2.9). Для удобства работы с рассчитанными данными есть возможность их сохранить. Также в программе есть модуль графического представления графиков потенциала, коэффициентов диффузии и других функций (см. рис. 2.10).

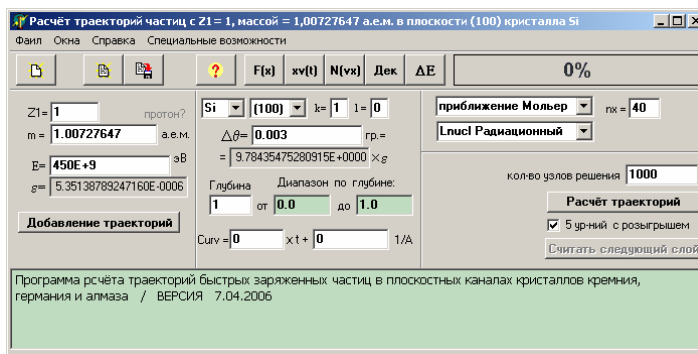


Рис .2.1 Главное окно программы. Здесь задаются основные начальные условия, такие как характеристики кристалла и частицы.

Рис. 2.2 Форма для задания начальных пространственного и углового распределений частиц в каналах кристалла. Задаются: диапазон значений поперечных координат точек влёта, вид функции распределения частиц по углам влёта – равномерное или нормальное распределения, в случае равномерного распределения указывается диапазон значений углов влёта, а в случае нормального распределения – среднее значение и среднеквадратичное отклонение.

Рис. 2.3 Форма для задания параметров многократного рассеяния.

Здесь задаются пороговые значения вторых моментов, длины T_{\min} и T_{\max} , а также выбирается модель многократного рассеяния SM ($U_{xx} = 0$) или PST.

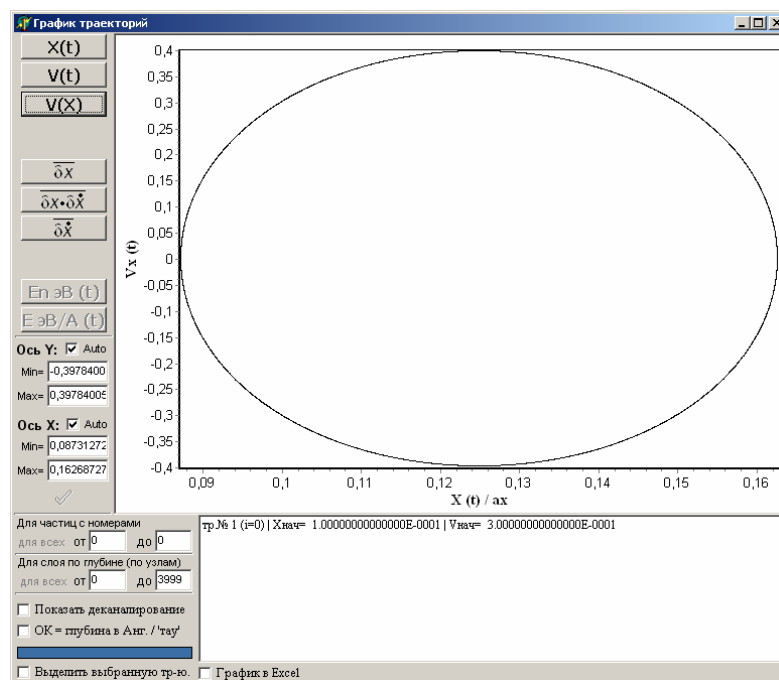


Рис. 2.4 Окно графического представления результатов расчёта траекторий. Для примера показана фазовая траектория подбарьерной частицы, вычисленная по модели XV.

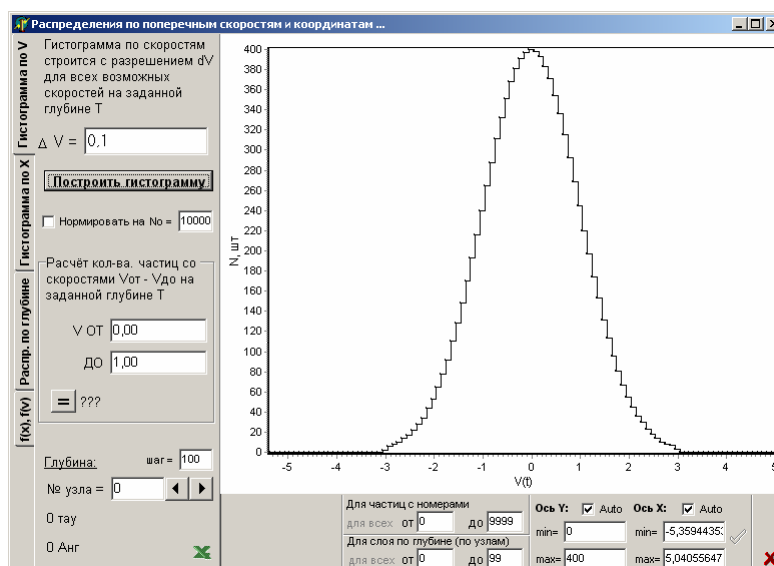


Рис. 2.5 Окно расчёта и графического представления пространственного и углового распределений. Для примера показан график начального распределения частиц по поперечным скоростям.

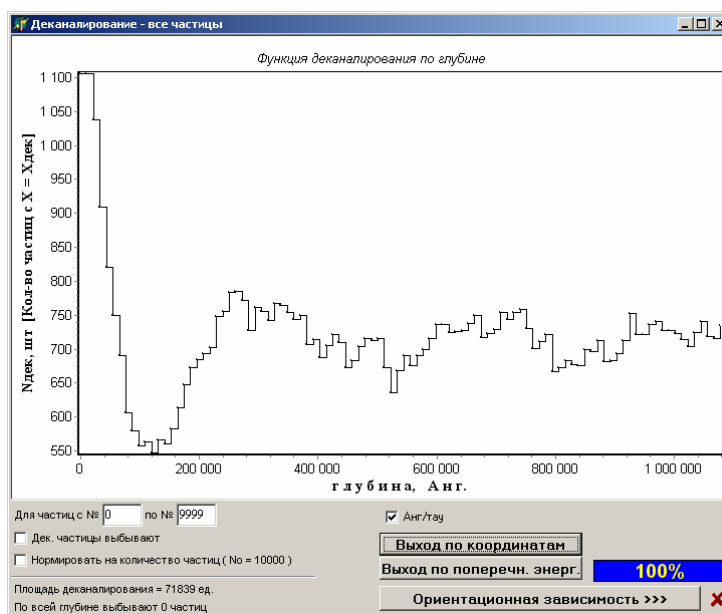


Рис. 2.6 Модуль расчёта функции деканалирования по модели критического приближения.

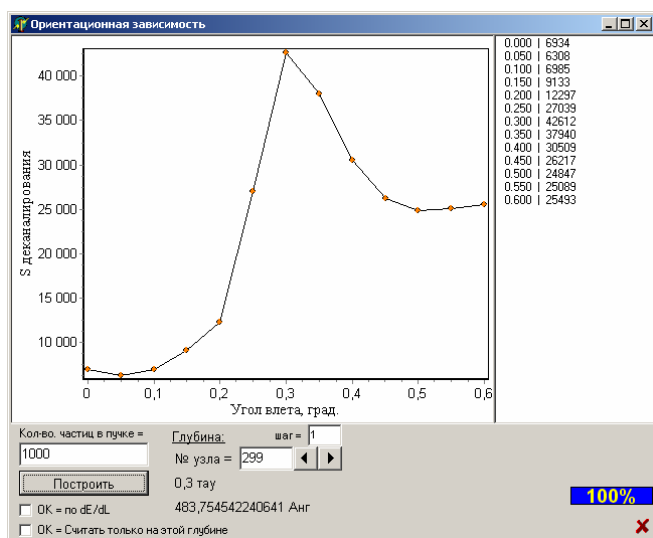


Рис. 2.7 Модуль расчёта ориентационной зависимости.

Ориентационную зависимость можно строить по модели критического приближения и методом отбора по потерям энергии.

Есть возможность проследить изменение вида зависимости с глубиной.

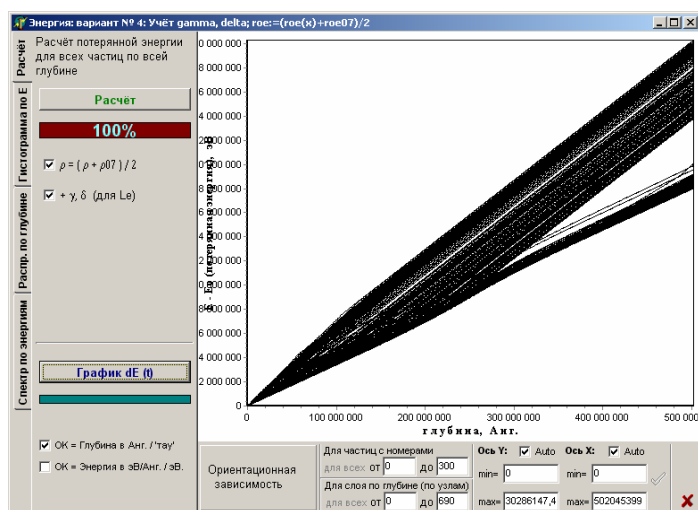


Рис. 2.8 Окно расчёта и графического представления потерь энергии, спектров и выходов, связанных с потерями энергии. Для примера приведены графики потерь энергии для 301 протона с энергией 450 ГэВ в (111) плоскостном канале изогнутого кристалла кремния.

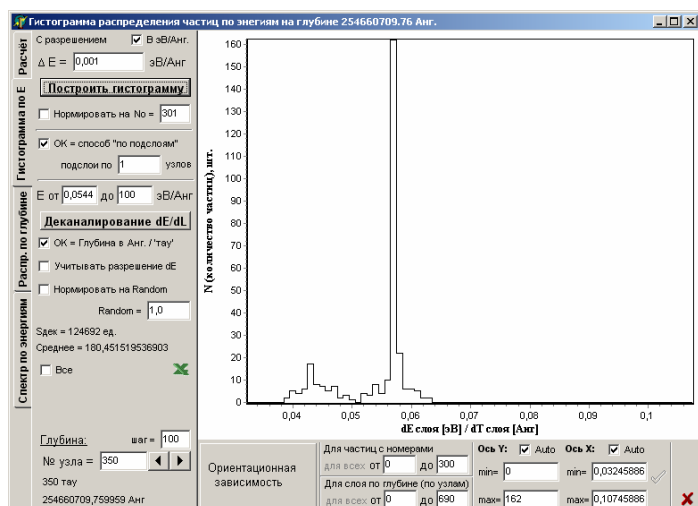


Рис. 2.9 Окно расчёта и графического представления гистограммы распределения частиц по удельным потерям энергии и выходов, полученных методом отбора по потерям энергии. Для примера построена гистограмма распределения по удельным потерям энергии потерь энергии пучка из 301 протона с энергией 450 ГэВ в (111) плоскостном канале изогнутого кристалла кремния на глубине 2.55 см.

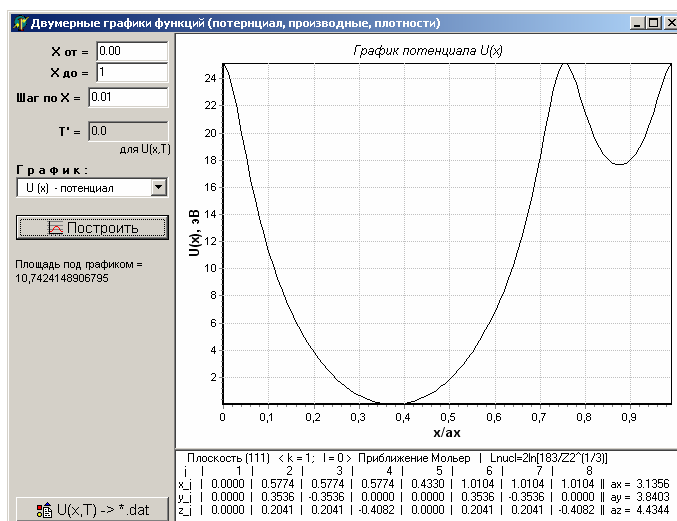


Рис. 2.10 Модуль графического представления потенциала, электронной и ядерной плотностей, коэффициентов диффузии.

Листинг программы приведён в приложении.

2.5 Достоверность результатов

Точность расчёта обеспечивалась следующими средствами:

1. Обезразмеривание динамических переменных, входящих в дифференциальные уравнения движения. Обезразмеривание проводилось таким образом, чтобы характерные интервалы изменения динамических переменных были порядка единицы.
2. Число членов разложения (n_x) в ряд Фурье для потенциала и коэффициента диффузии подбиралось таким образом, чтобы вид указанных функций, а также первой и второй производных потенциала не зависели от n_x . В расчётах $n_x = 40$.
3. Длина шага решения выбиралась так, чтобы выполнялся закон сохранения энергии для подбарьерной частицы.

На начальном этапе разработки программы первые результаты сравнивались с результатами, полученными с помощью математического пакета Maple 8 компании Waterloo Maple Inc.

В результате обезразмеривания переменные становятся одного порядка. Сам численный метод, используемый для решения уравнения движения, часто применяется для моделирования различных физических процессов и обладает большой точностью. Здесь необходимо отметить, что точность

решения зависит от величины шага решения. Так, методом подбора, было установлено, что при шаге решения, равном $1/500$ безразмерной глубины, получаются хорошие результаты, но в расчётах мы задавали шаг, равным $1/1000$ безразмерной глубины. При подборе величины шага проверялось сохранение закона сохранения энергии для подбарьерной частицы при расчёте без многократного рассеяния (см. рис.2.4). Также свою роль в точность решения вносит число членов n_x разложения в ряд Фурье для потенциала и форм-фактора электронной плотности. Было установлено, что при $n_x = 20$ вид потенциала уже не зависит от n_x , т.е. возможно вести расчёт по модели XV, при $n_x = 30$ от n_x перестают зависеть также вид первой и второй производных потенциала, при этом можно рассчитывать по модели PST. Для расчётов мы используем $n_x = 40$.

ГЛАВА 3. МОДЕЛИРОВАНИЕ ДВИЖЕНИЯ БЫСТРЫХ ЗАРЯЖЕННЫХ ЧАСТИЦ В ПРЯМЫХ КРИСТАЛЛАХ

В данной главе рассматривается применение метода компьютерного моделирования к описанию движения быстрых заряженных частиц в плоскостных каналах прямых кристаллов. С помощью компьютерного моделирования исследуется спектр потерь энергии быстрых заряженных частиц, а также выход частиц (деканализация), рассчитанный методом отбора по потерям энергии. Производится сравнение выходов релятивистских протонов и ионов гелия с энергиями 14 МэВ и 14 ГэВ из плоскостных каналов кристаллов германия и кремния, полученных по стандартной модели и по модели PST. Для выяснения причин расхождения выходов, рассчитанных по стандартной модели и модели PST, приводятся графики траекторий и вторых моментов функции распределения для релятивистских и нерелятивистских заряженных частиц. Также, исследуются плоскостные колебания ионов гелия с энергией 2 МэВ в (110) плоскостном канале кристалла кремния и строится ориентационная зависимость. Кроме того, с целью демонстрации возможности созданной компьютерной программы работать с отрицательно заряженными частицами, приводятся графики потенциала и траекторий для антипротонов с энергией 15 ГэВ в (100) плоскостном канале кристалла германия. Также, исследуются особенности движения быстрых заряженных частиц в электрическом поле переходной области ось-плоскость. Приводятся трёхмерные графики потенциалов, в случаях движения быстрой заряженной частицы в плоскостном канале (100) под небольшим углом к атомной цепочке $\langle 010 \rangle$ и при двух различных углах относительно атомной цепочки $\langle 011 \rangle$. Показаны траектории, пространственные и угловые распределения частиц в этих случаях. Здесь необходимо отметить, что несмотря на вид потенциала переходной области и показанные искажения траекторий, в условиях экспериментов, обработанных с помощью созданной компьютерной программы влияние переходной области оказывается незначительным.

3.1. Исследование плоскостных колебаний

Исследование эффекта плоскостных колебаний быстрых заряженных частиц в кристаллах является актуальной задачей. Данный эффект применяется для определения местоположения атомов примесей в кристаллах (см., например [14,16]). В работе [14] исследовался спектр обратного рассеяния ионов He^+ для определения местоположений атомов примеси висмута в кристалле кремния. Пучок ионов He^+ направлялся на кристалл кремния под небольшим углом $\Delta\theta$ к кристаллографической оси (рис. 3.1). Проходя через кристалл, часть частиц рассеивалась (резерфордовское обратное рассеяние).

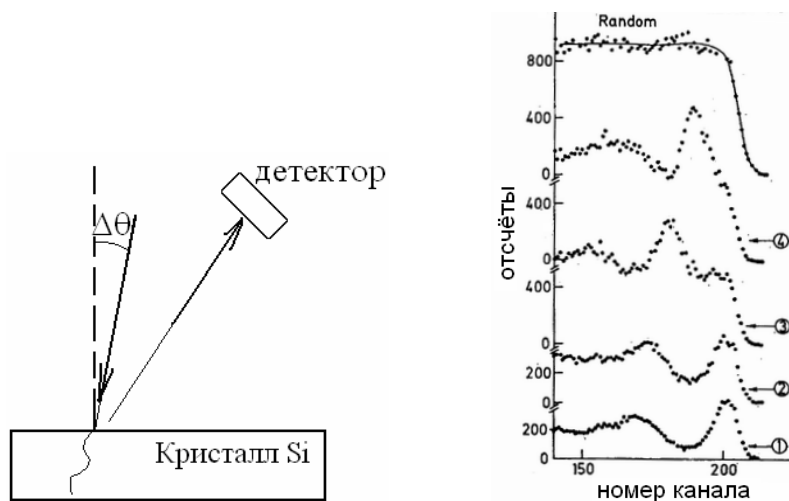


Рис. 3.1. Схема эксперимента и полученные спектры: ионы гелия направляются под углом $\Delta\theta = 7^\circ$ к оси $\langle 011 \rangle$ в плоскостном направлении (100) под небольшими углами к плоскости, обратное рассеяние определяется с помощью детектора. В полученном с помощью детектора спектре можно видеть плоскостные колебания, вид которых зависит от угла влёта частиц по отношению к плоскости. Спектры нумеруются в порядке увеличения угла относительно плоскости (спектр “1” соответствует углу $\psi \approx -0.086^\circ$, “2”- $\psi \approx 0.134^\circ$, “3”- $\psi \approx 0.183^\circ$, “4”- $\psi \approx 0.252^\circ$). Спектр, обозначенный “Random” соответствует большому углу к плоскости.

Известно, что колебания в спектре обратного рассеяния связаны с колебаниями частиц в каналах кристалла. Частица, при движении в канале, совершает колебания между “стенками” канала, где вероятность рассеяния частицы максимальная, а также эти места характеризуются повышенной электронной плотностью. Поэтому колебания в спектре обратного рассеяния можно связать и с колебаниями в спектре потерь энергии на электронах.

Очевидно, что характер движения быстрых заряженных частиц в каналах зависит от их угла влёта относительно плоскостного направления (рис. 3.2).

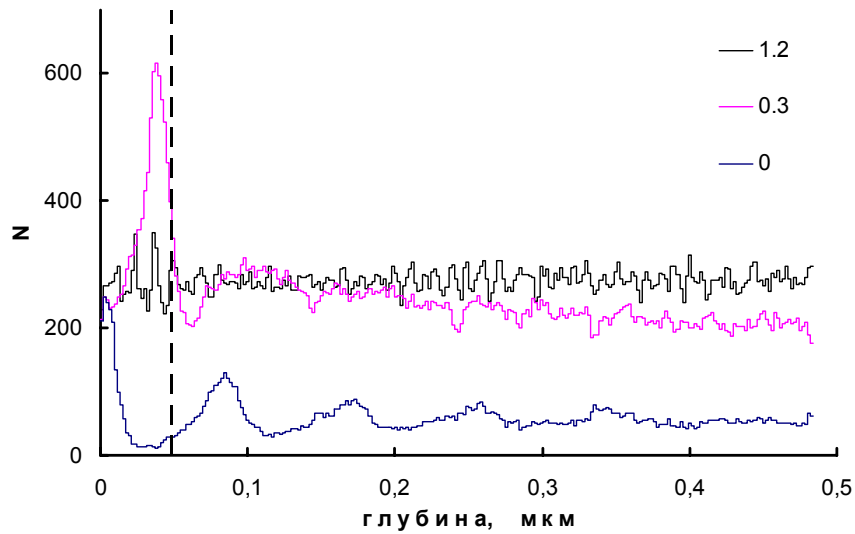


Рис. 3.2. Графики выходов 2 МэВ ионов гелия, влетающих под углом $\Delta\theta = 7^\circ$ к оси $\langle 011 \rangle$ в плоскостном направлении (100) под углами $\Psi = 0^\circ$, 0.3° , 1.2° относительно атомной плоскости (110) с угловой расходимостью 0.05° . Расчёты проводились для 1000 ионов гелия по программе PST. Условие розыгрыша $T_{\min} = 0.01$ мкм. Деканализирование рассчитывалось методом отбора по потерям энергии, пороговое значение $(\Delta E/\Delta L)_D = 242$ кэВ/мкм. Представленные графики выходов рассчитаны при разрешении по глубине 0.0162 мкм. Вертикальной пунктирной линией показана граница интервала, в пределах которого рассчитывалась ориентационная зависимость, представленная рис. 3.3.

$\Psi = 0^\circ$ соответствует точной ориентации пучка в плоскостном канале (110): этот случай соответствует минимальным удельным потерям энергии каналированных частиц и определяет χ_{\min} - так называемый, минимальный выход. Пучок, направленный по $\Psi = 0.3^\circ$ имеет наибольшие удельные потери и соответствует “плечам” ориентационной зависимости (критический угол каналирования $\Psi = 0.27^\circ$). Направление пучка $\Psi = 1.2^\circ$ соответствует хаотическому (неканализованному) направлению. Превышение выхода соответствующего значения для хаотического (“рандомного”) направления связано с каналированными частицами, движущимися в области повышенной электронной плотности. Отметим, что в работе [17] было впервые экспериментально показано, что потери энергии в осцилляциях превышают рандомные.

Ориентационная зависимость строится как зависимость площади под графиком нормированного выхода от угла Ψ . Нормирование производится на площадь под графиком выхода при угле $\Psi = 1.2^\circ$. При этом нас интересует площадь, рассчитанная до глубины 0.05 мкм, т.к. эта глубина соответствует четверти периода плоскостных колебаний.

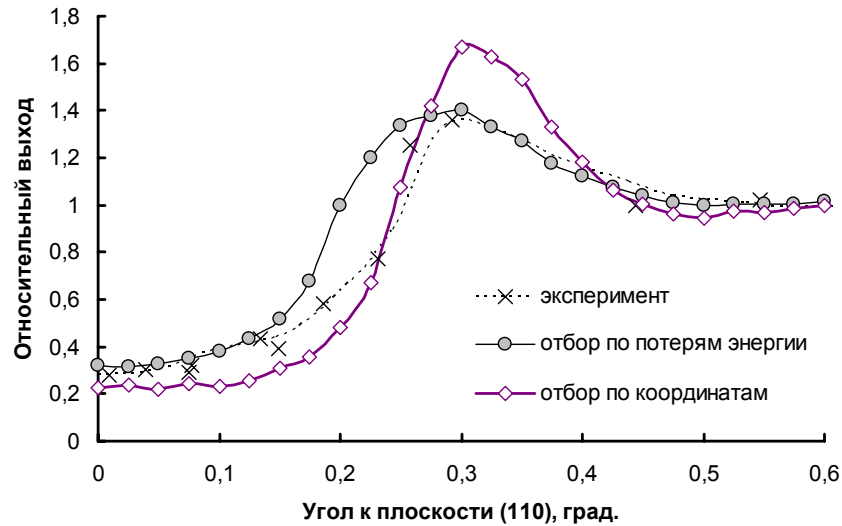


Рис. 3.3. Ориентационные зависимости для ионов гелия с энергией 2 МэВ в (110) плоскостном канале кристалла кремния. Представленные ориентационные зависимости построены по результатам расчётов 24 пучков по 1000 ионов гелия, влетающих в кристалл под углами от 0 до 0.6° с угловой расходимостью 0.05° . Условия розыгрыша и пороговое значение удельных потерь энергии как на рис. 3.2. На рисунке производится сравнение ориентационных зависимостей, рассчитанных по моделям деканализирования, связанными с отборами по потерям энергии и по поперечным координатам с экспериментальными данными.

На рис. 3.2 видно, что плоскостные колебания затухают с глубиной, что можно объяснить установлением движения быстрых заряженных частиц в каналах кристалла. Глубина, на которой затухают плоскостные колебания составляет порядка двух периодов колебаний частицы в канале.

3.2. Исследование деканализирования релятивистских частиц

В работе [25] сообщалось об обнаружении уменьшения скорости деканализирования положительно заряженных релятивистских частиц из плоскостных и осевых каналов кристаллов кремния и германия. До настоящего вре-

мени данный эффект не был объяснён. В рамках модели PST учёт влияния потенциала уменьшает флуктуации частицы по поперечной координате и скорости при релятивистских энергиях, что приводит к уменьшению интенсивности многократного рассеяния по сравнению со стандартной моделью, и, следовательно, уменьшается также и деканалирование. Также известно, что стандартная модель хорошо описывает экспериментальные данные для небольших (\sim МэВ) энергий [6].

Деканалирование будем рассчитывать методом отбора по потерям энергии. Рассмотрим применение этого метода отбора для протонов с энергией 15 ГэВ в (100) плоскостном канале кристалла германия. На рис. 3.4 представлена гистограмма результатов расчёта распределения по удельным потерям энергии 1000 протонов с энергией 15 ГэВ на глубине 0.4 мм.

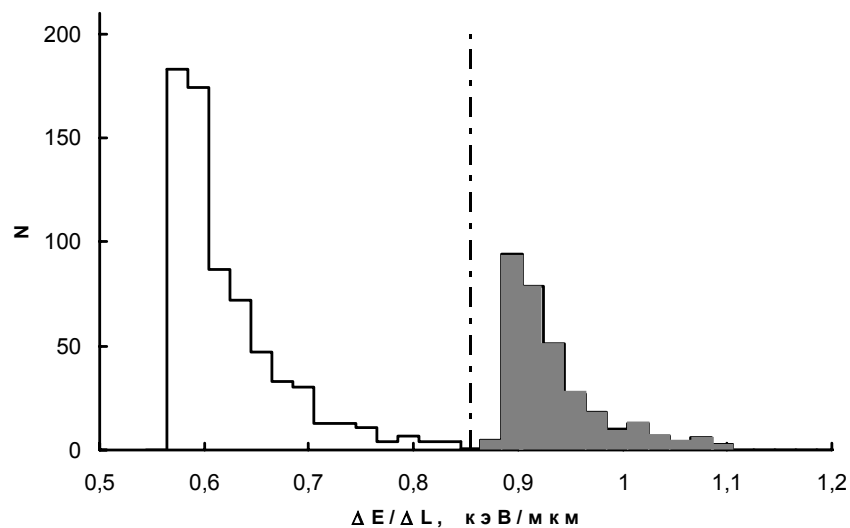


Рис. 3.4. Гистограмма результатов расчёта распределения по удельным потерям энергии 1000 протонов с энергией 15 ГэВ на глубине 0.4 мм в (100) плоскостном канале кристалла германия, рассчитанная с разрешением по энергии 0.04 кэВ/мкм. В структуре спектра можно выделить два пика: левый при 0.55 кэВ/мкм связан с каналированными частицами, правый при 0.9 кэВ/мкм — с деканалированными частицами. Пороговое значение $(\Delta E/\Delta L)_D = 0.0855$ кэВ/мкм обозначено вертикальной линией. Указанное значение $(\Delta E/\Delta L)_D$ найдено как значение удельных потерь энергии во втором пике, умноженное на 0.95. Число деканалированных частиц определяется как площадь под вторым пиком (закрашенная область).

График относительного выхода (рис. 3.5) строится как зависимость доли деканалированных частиц от глубины проникновения в кристалл. Для это-

го рассчитывается площадь под вторым пиком в гистограмме средней скорости потерь энергии на глубинах, кратных заданному разрешению.

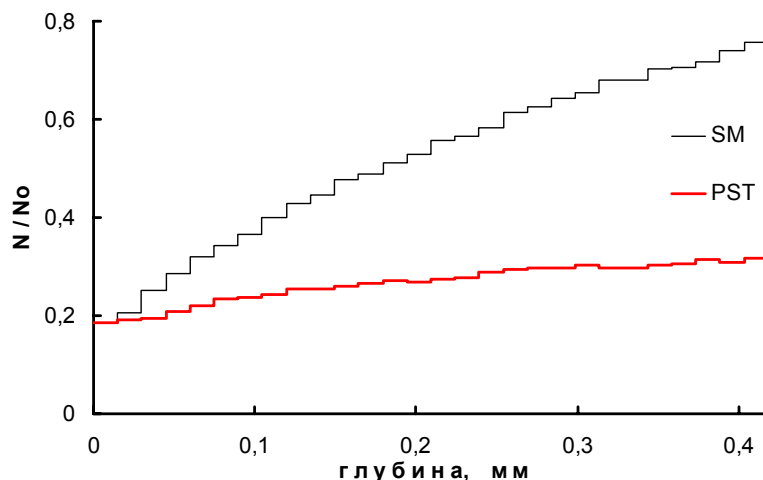


Рис. 3.5. Графики относительных выходов 1000 протонов с энергией 15 ГэВ в (100) плоскостном канале кристалла германия, рассчитанные при разрешении по глубине 15 мкм по моделям SM и PST. Выходы рассчитывались методом отбора по потерям энергии.

На рис. 3.6 представлены графики выходов ионов гелия с энергиями 14 МэВ и 14 ГэВ, рассчитанные по моделям SM и PST.

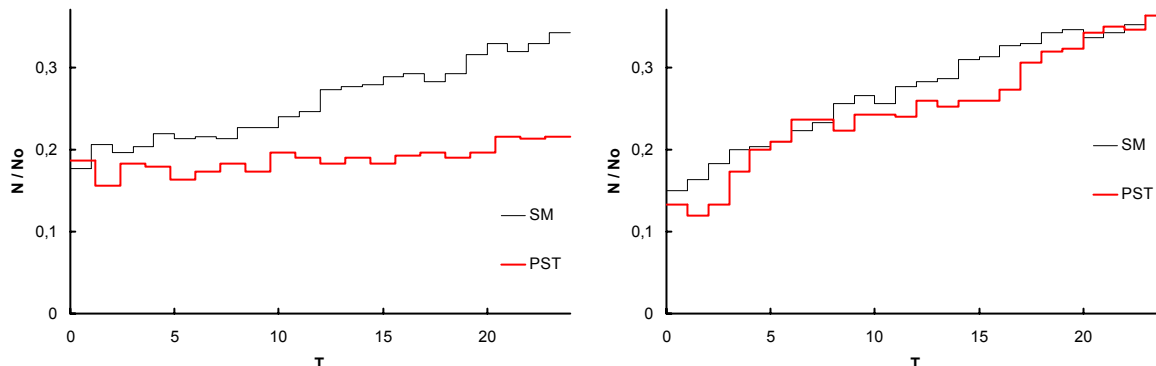


Рис. 3.6. Графики относительных выходов ионов гелия с энергиями 14 ГэВ (левый график) и 14 МэВ в (110) плоскостном канале кристалла кремния, рассчитанные по моделям SM и PST. Глубина представлена в безразмерных единицах, соответствующих периоду плоскостных колебаний. Выходы рассчитывались методом отбора по потерям энергии.

В ходе сравнения данных, полученных с помощью моделей PST и SM, было установлено, что для низких энергий (МэВ) значения выходов по PST и SM близки, а для больших энергий выход по SM идёт выше, что не соответствует экспериментальным данным. Также было обнаружено, что для ГэВ-

энергий количество актов многократного рассеяния по модели PST меньше, чем по модели SM (см. рис.3.6).

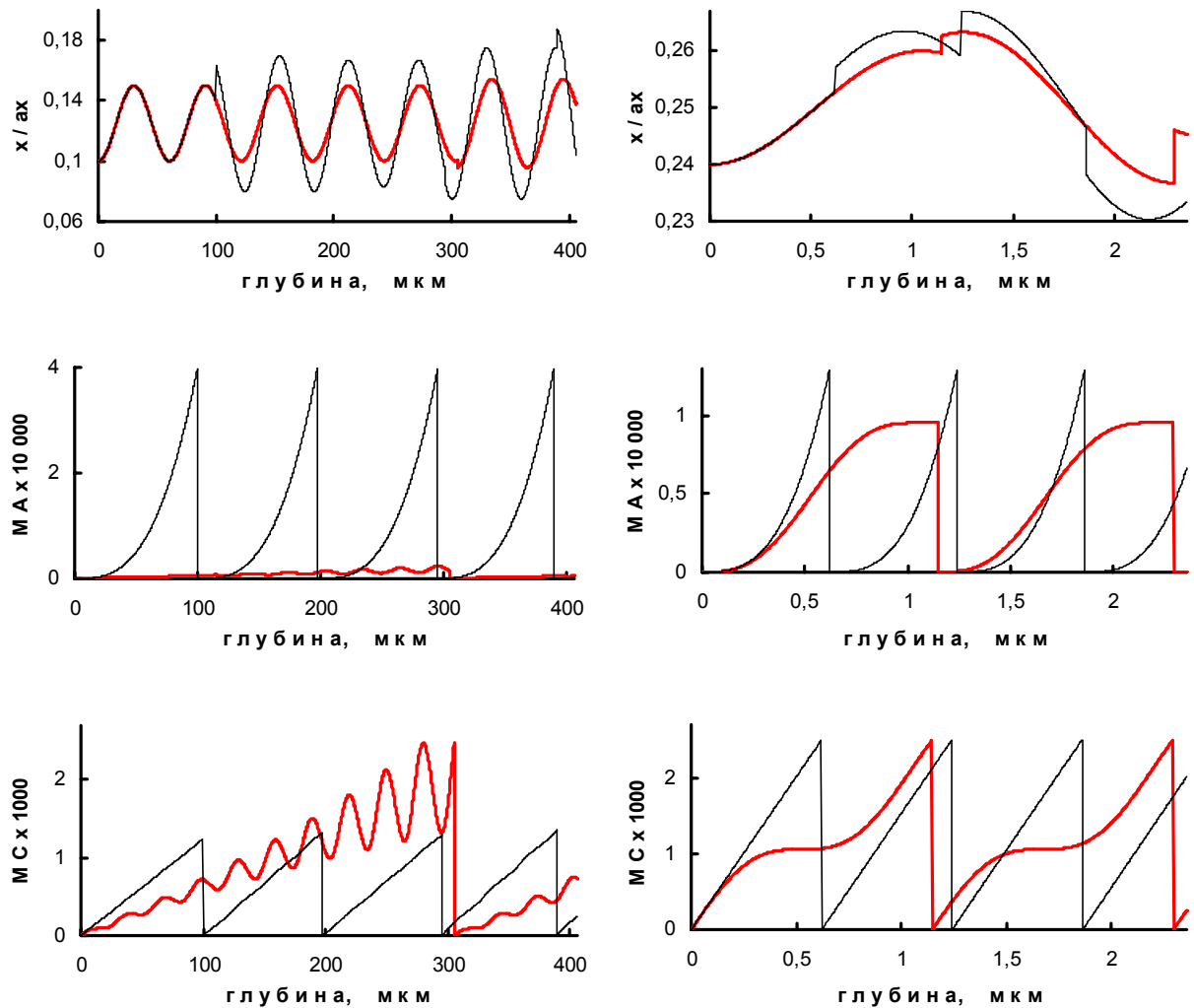


Рис. 3.7. Графики траекторий и вторых моментов, для одного протона по модели PST (выделенная линия) и одного протона по модели SM с энергией 450 ГэВ в (100) плоскостном канале кристалла кремния, при начальных условиях $x/a_x = 0.1$, $V_x = 0$ (левые графики), и для 100 МэВ протонов в (110) плоскостном канале кристалла кремния, при $x/a_x = 0.24$, $V_x = 0$.

Для надбарьерных траекторий различия по числу розыгрышей между результатами, полученными по моделям PST и SM, отсутствуют при углах влёта частицы много больших критического угла каналирования Линдхарда Ψ_L (рис. 3.8).

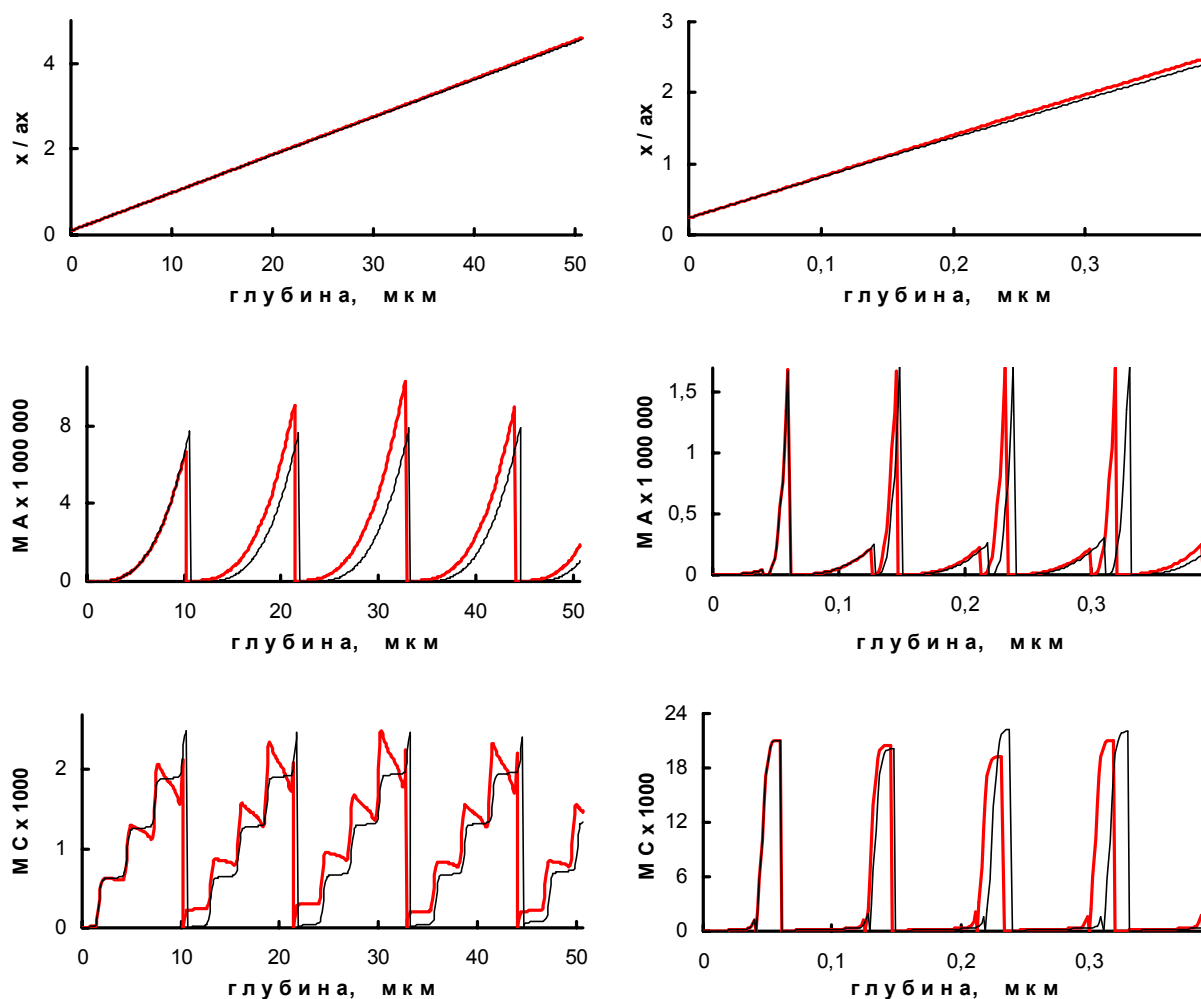


Рис. 3.8. Графики траекторий и вторых моментов, для одного протона по модели PST (выделенная линия) и одного протона по модели SM с энергией 450 ГэВ в (100) плоскостном канале кристалла кремния, при начальных условия $x/a_x = 0.1$, $V_x = 9$ (левые графики), и для 100 МэВ протонов в (110) плоскостном канале кристалла кремния, при $x/a_x = 0.24$, $V_x = 9$.

3.3. Движение отрицательно заряженных частиц

Для отрицательно заряженных частиц потенциал взаимодействия имеет вид, представленный на рис. 3.9. При этом потенциальная яма для отрицательно заряженных частиц находится в области расположения ядер атомов кристалла, а распределение электронной плотности и коэффициенты диффузии, ответственные за рассеяние остаются такими же, как в случае движения положительно заряженных частиц. Из чего можно сделать вывод, что для подбарьерной (канализированной) отрицательно заряженной частицы интенсивность многократного рассеяния будет больше, чем для надбарьерной частицы, что можно видеть на рис. 3.10, где представлены траектории подбарьер-

ерной и надбарьерной частиц, рассчитанные по модели PST. Также на рис. 3.10 можно видеть, что потери энергии подбарьерной отрицательно заряженной частицы больше, чем для надбарьерной.

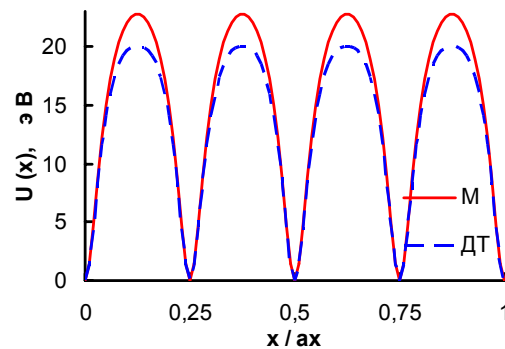


Рис. 3.9. Потенциал плоскостного канала (100) кристалла германия для антипротонов, рассчитанный в приближениях Мольер и Дойля-Тёрнера.

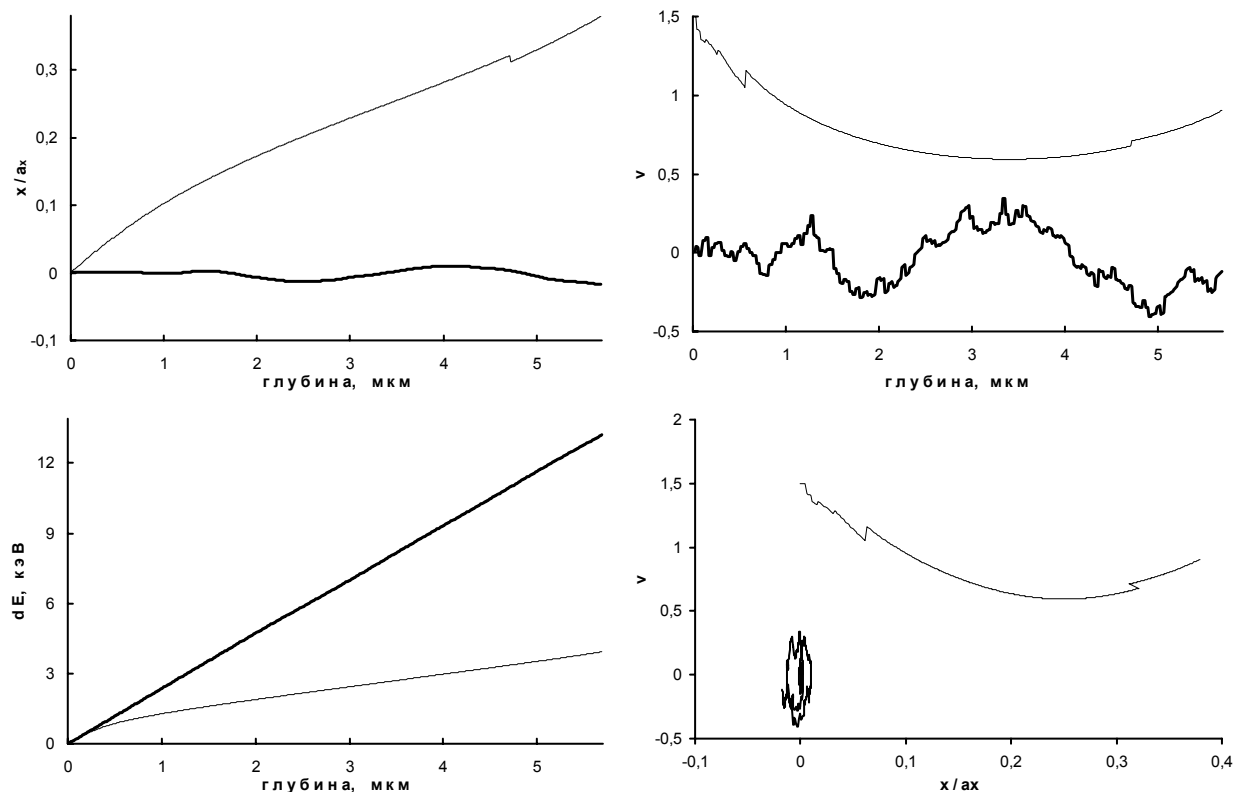


Рис. 3.10. Графики траекторий $x(t)$, поперечных скоростей $v(t)$, потерь энергии и фазовые траектории антипротонов с энергий 15 ГэВ в (100) плоскостном канале кристалла германия. Для сравнения представлены траектории подбарьерной (выделенная линия) частицы (начальные условия $x/a_x = 0.01$, $v = 0$) и надбарьерной частицы ($x/a_x = 0.01$, $v = 1.5$). Можно заметить, что число розыгрышей для подбарьерной частицы намного больше, чем для надбарьерной.

3.4. Исследование влияния переходной области ось-плоскость

Потенциал переходной области ось-плоскость был получен при решении уравнения движения быстрой заряженной частицы в кристалле методом многих масштабов, с учётом того, что атомная плоскость составлена из атомных цепочек. Был получен потенциал, состоящий из двух слагаемых, одно из которых описывает взаимодействие с атомными плоскостями, а другое - влияние атомных цепочек (см. 1.28, 2.5).

Трёхмерные графики потенциалов, в случаях движения быстрой заряженной частицы в плоскостном канале (100) под небольшим углом к атомной цепочке $\langle 010 \rangle$ и при двух различных углах относительно атомной цепочки $\langle 011 \rangle$ приведены на рис. 3.11 -3.13. На рис. 3.11 видно, что в случае движения быстрой заряженной частицы в плоскостном канале под небольшим углом $\Delta\theta$ к атомной цепочке $\langle 010 \rangle$ проявляется только плоскостной потенциал. Из сравнения рис. 3.12 и рис. 3.13 можно сделать вывод, что при увеличении угла $\Delta\theta$ колебания потенциала по глубине становятся более частыми.

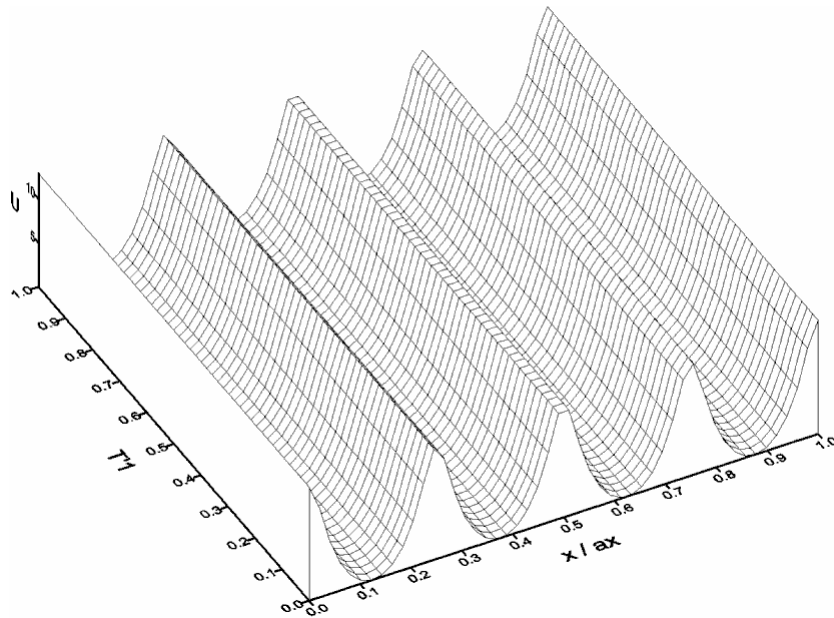


Рис. 3.11. Потенциал переходной области ось-плоскость для протонов в плоскостном направлении (100) при угле разориентации $\Delta\theta \geq \varepsilon$ по отношению к атомной цепочке $\langle 010 \rangle$. По осям отложены: x/ax – поперечная координата, T_1 – безразмерная глубина, U – высота потенциального барьера.

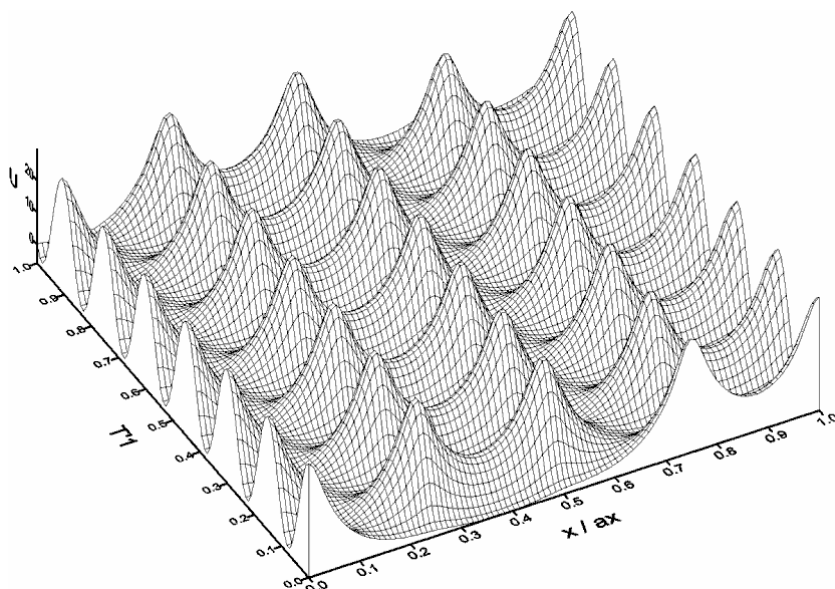


Рис. 3.12. Потенциал переходной области ось-плоскость для протонов в плоскостном направлении (100) при угле разориентации $\Delta\theta \approx 4.5 \cdot \epsilon$ по отношению к атомной цепочке $\langle 011 \rangle$.

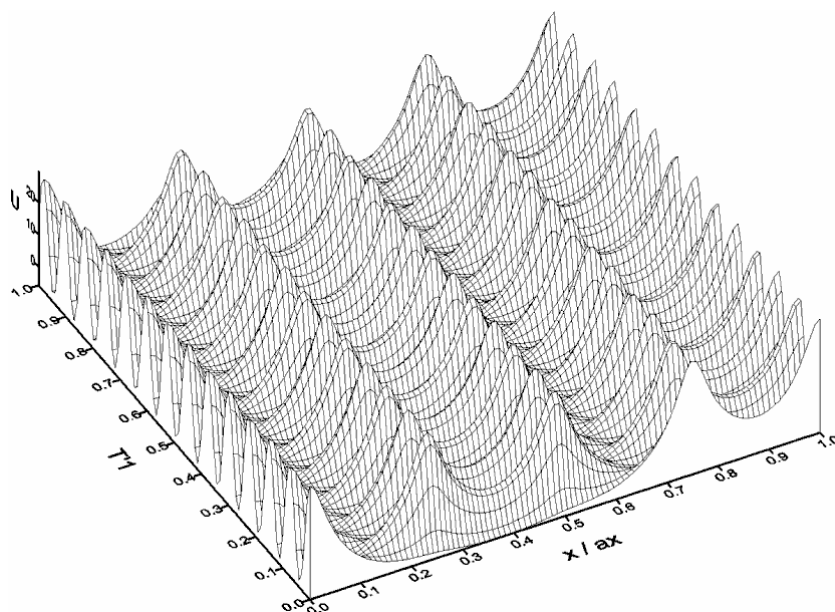


Рис. 3.13. Потенциал переходной области ось-плоскость для протонов в плоскостном направлении (100) при угле разориентации $\Delta\theta \approx 9 \cdot \epsilon$ по отношению к атомной цепочке $\langle 011 \rangle$.

Судя по приведённым видам потенциалов, движение каналированных быстрых заряженных частиц в (100) плоскостном канале кристалла при заданном значении угла разориентации $\Delta\theta$ по отношению к атомным цепочкам $\langle 100 \rangle$ и $\langle 110 \rangle$ должно быть существенно различным.

Для исследования влияния переходной области ось-плоскость были рассчитаны траектории 1000 протонов с энергией 1 ГэВ в (100) плоскостном канале кристалла кремния. Угол относительно цепочек $\langle 010 \rangle$ и $\langle 011 \rangle$ был $\Delta\theta = 0.05^\circ$, что соответствует $\Delta\theta \approx 9 \cdot \varepsilon$. Точки влёта были равномерно распределены в интервале $0 \leq x/a_x \leq 1$, т.е. заселялось 4 плоскостных канала, а поперечные скорости были равномерно распределены в интервале $-\sqrt{2} \leq V_x \leq \sqrt{2}$, т.е. в пределах критического угла каналирования Линдхарда.

Из рис. 3.14 и рис. 3.15 можно видеть как перераспределяются частицы, после прохождения слоя кристалла 5.8 мкм. Часть частиц, оставшихся в интервале $0 \leq x/a_x \leq 1$ распределились по четырём плоскостным каналам. Можно отметить наличие симметрии в распределениях в случае движения относительно цепочки $\langle 010 \rangle$.

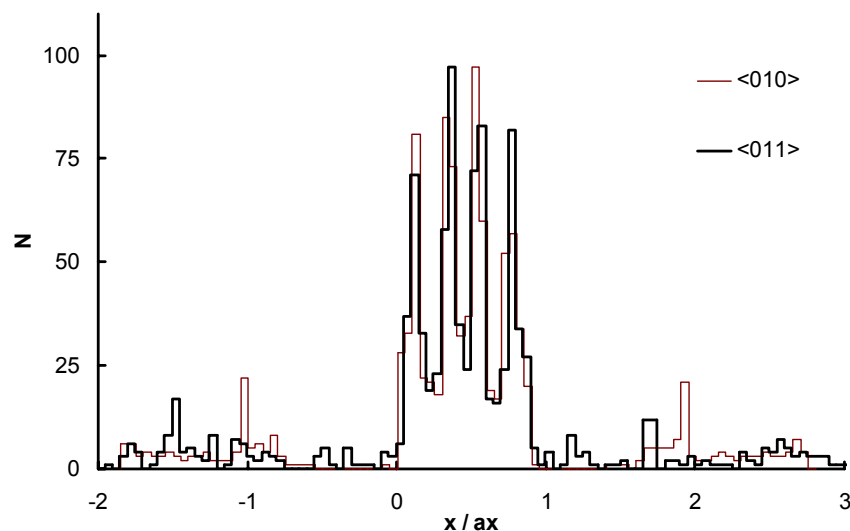


Рис. 3.14. Распределения частиц по поперечным координатам, после прохождения слоя кристалла, длиной 5.8 мкм. Распределения рассчитаны с разрешением $x/a_x = 0.05$.

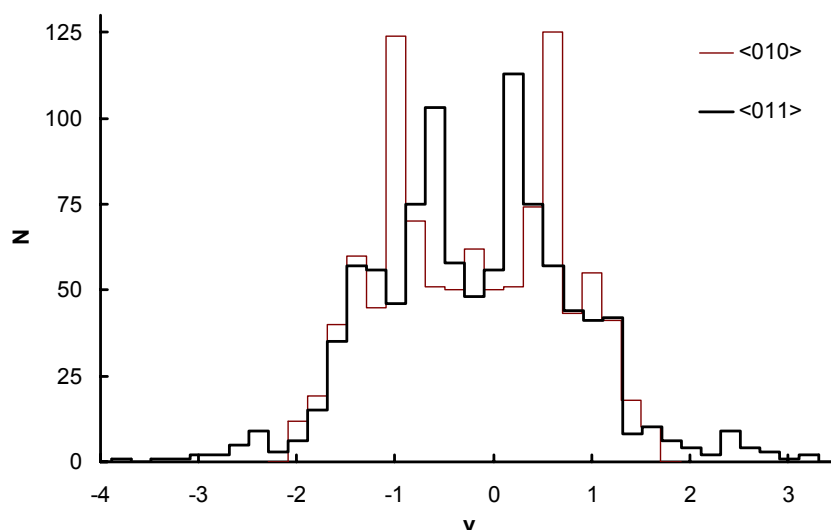


Рис. 3.15. Распределения частиц по поперечным скоростям, после прохождения слоя кристалла, длиной 5.8 мкм. Распределения рассчитаны с разрешением $v = 0.2$.

На рис. 3.16 и рис. 3.17 проводится сравнение графиков выхода протонов с энергией 1 ГэВ при их влёте под небольшим углом $\Delta\theta = 0.05^\circ$ относительно цепочек $\langle 010 \rangle$ и $\langle 011 \rangle$, рассчитанных методами отбора деканализированных частиц по поперечным скоростям и по потерям энергии.

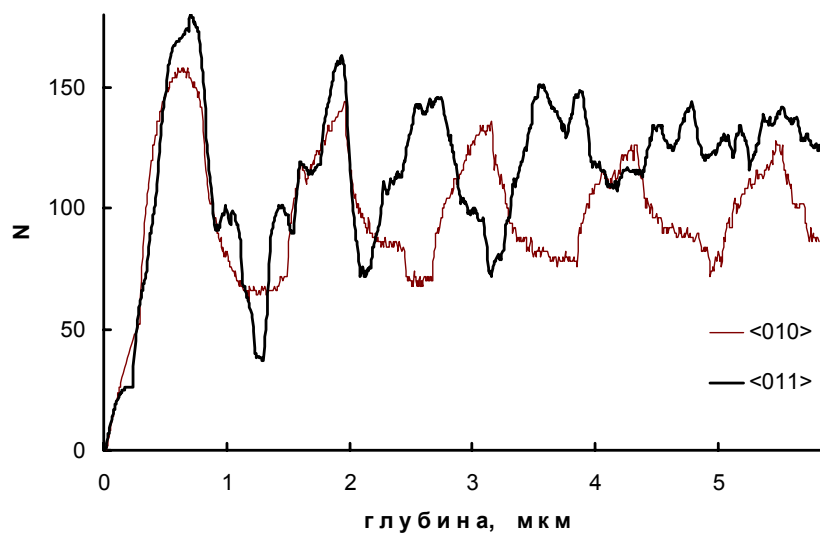


Рис. 3.16. Графики выходов частиц, рассчитанные методом отбора по поперечным скоростям. Графики были рассчитаны с разрешением по глубине $5.8 \cdot 10^{-3}$ мкм.

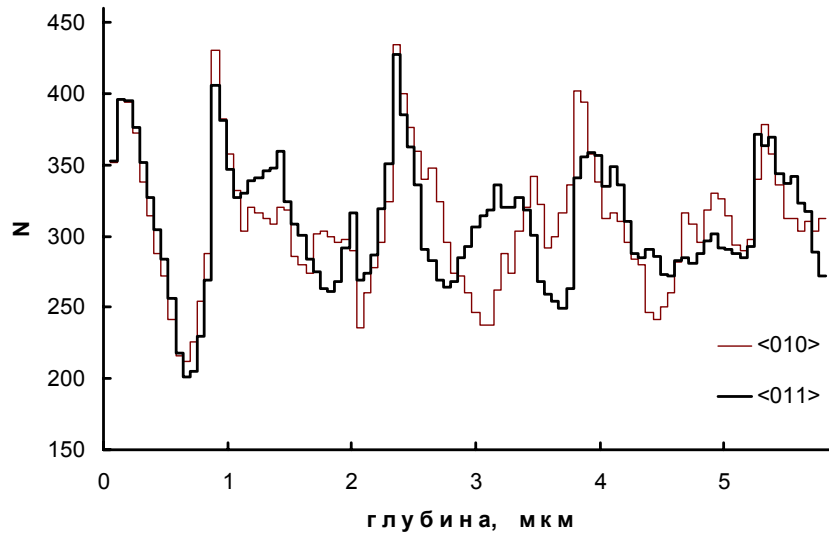


Рис. 3.17. Графики выходов частиц, рассчитанные методом отбора по потерям энергии. Графики были рассчитаны с разрешением по глубине $5.8 \cdot 10^{-2}$ мкм. Пороговое значение потерь энергии $(\Delta E/\Delta L)_H = 0.4731$ кэВ/мкм.

Рассмотрим действие переходной области ось-плоскость на траектории протонов с энергией 1 ГэВ в (100) плоскостном канале кристалла кремния. На рис. 3.18 показаны графики траекторий, поперечных скоростей и фазовых траекторий в случаях отсутствия переходной области (движение относительно <010>) и при направлении частиц под углом $\Delta\theta = 0.05^\circ$ относительно цепочки <011>. Здесь можно видеть небольшие отличия в графиках траекторий, искажения графиков поперечных скоростей и фазовых траекторий. При меньшем угле $\Delta\theta$ относительно цепочки <011> действие переходной области более заметно. На рис. 3.19 приведены траектории протонов с энергией 1 ГэВ в (100) плоскостном канале кристалла кремния, направленных под углом $\Delta\theta = 0.025^\circ$ к атомной цепочке <011>.

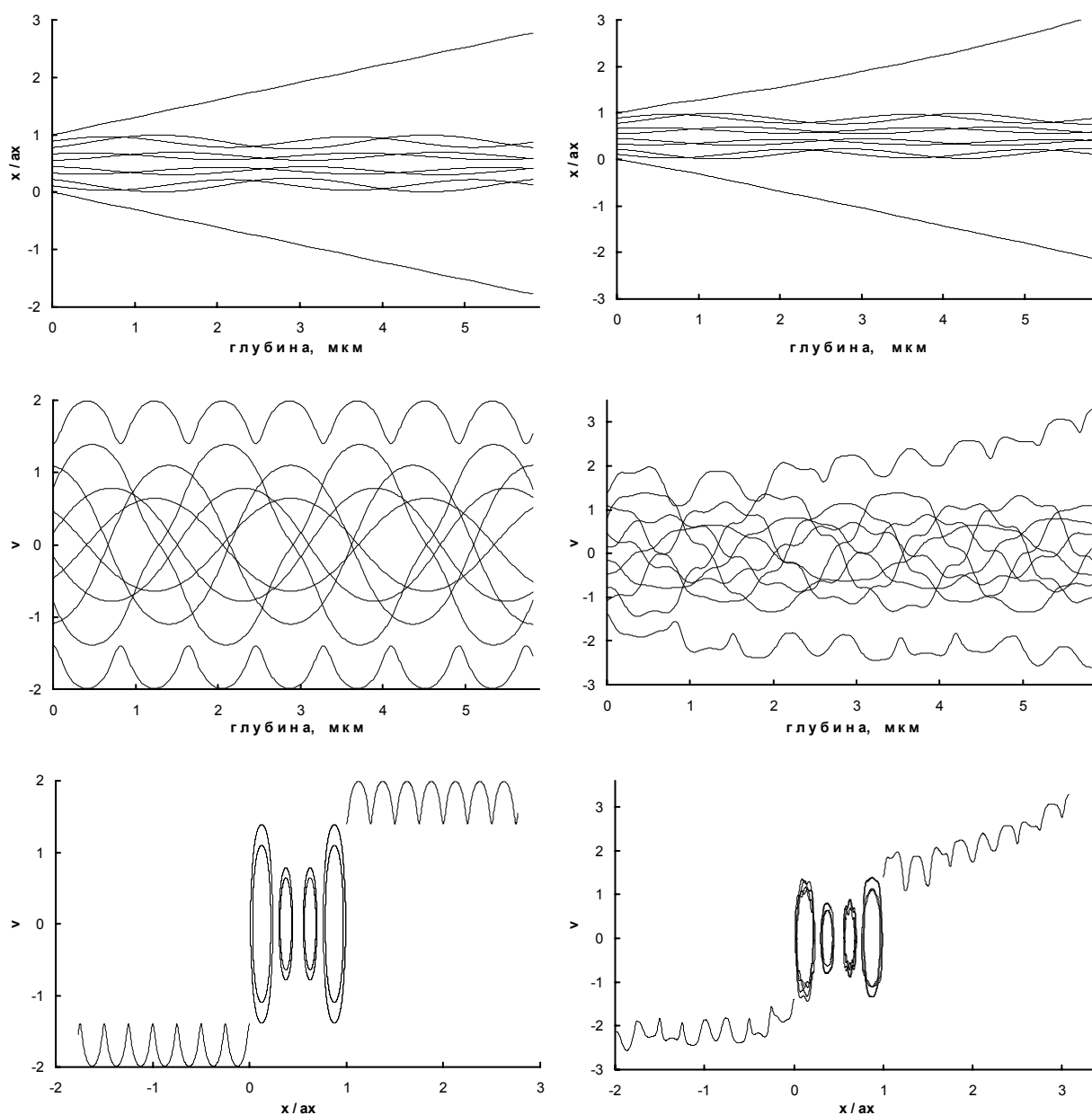


Рис. 3.18. Графики траекторий и поперечных скоростей, а также фазовых траекторий для 10 протонов с энергией 1 ГэВ в (100) плоскостном канале кристалла кремния, направленных под углом $\Delta\theta = 0.05^\circ$ к атомным цепочкам <010> (левые графики) и <011>. Начальные условия для точек и углов влёта: (0;-1.4), (0.11;-1.09), (0.22;-0.78), (0.33;-0.47), (0.44;-0.16), (0.56; 0.16), (0.67; 0.47), (0.78; 0.78), (0.88; 1.09), (1; 1.4).

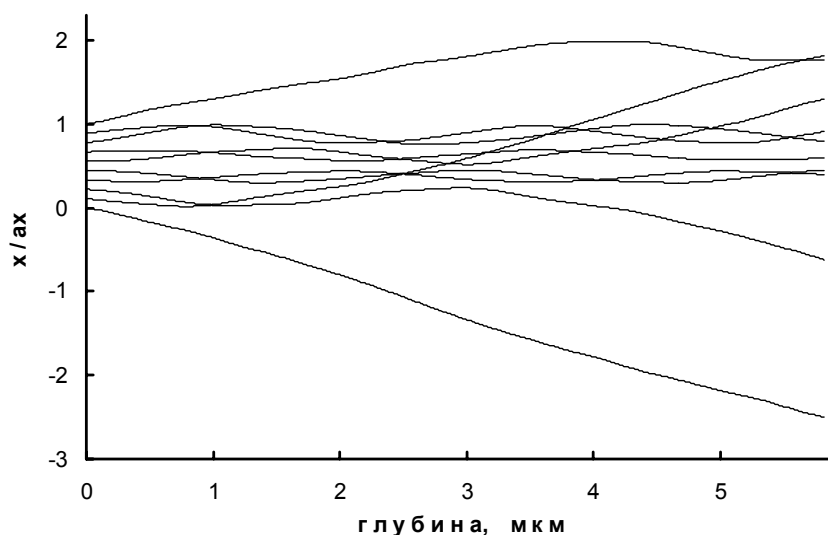


Рис. 3.19. Графики траекторий для 10 протонов с энергией 1 ГэВ в (100) плоскостном канале кристалла кремния, направленных под углом $\Delta\theta = 0.025^\circ$ к атомной цепочке $\langle 011 \rangle$. Начальные условия для точек и углов влёта такие же, как на рис. 3.14.

Таким образом, можно сделать вывод, что наиболее заметное действие переходная область оказывает при небольшом угле $\Delta\theta$ к атомной цепочке, при увеличении угла $\Delta\theta$ увеличивается частота колебаний потенциала по глубине, а действие переходной области на траектории уменьшается.

Несмотря на вид потенциала переходной области и показанные искажения траекторий, в условиях экспериментов, обработанных с помощью созданной компьютерной программы влияние переходной области оказывается незначительным. Например, на рис. 3.20 показано сравнение ориентационных зависимостей для ионов гелия с энергией 2 МэВ в (110) плоскостном канале кристалла кремния для случаев направления пучка ионов под углами $\Delta\theta = 7^\circ \approx 36 \cdot \varepsilon$ и $\Delta\theta = 0.7^\circ \approx 3.6 \cdot \varepsilon$ к атомной цепочке $\langle 011 \rangle$.

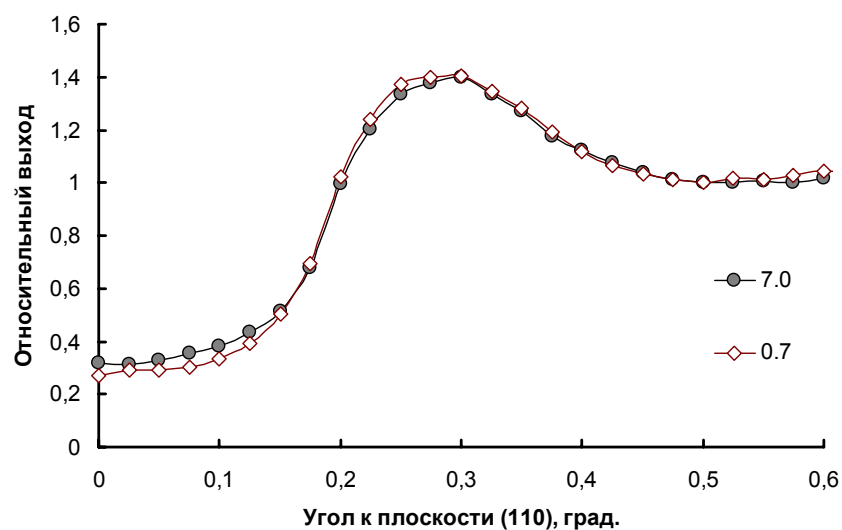


Рис. 3.20. Ориентационные зависимости для ионов гелия с энергией 2 МэВ в (110) плоскостном канале кристалла кремния, направленных под углами 7° и 0.7° к атомной цепочке $\langle 011 \rangle$. Условия розыгрыша и способ определения деканалирования как на рис. 3.2.

ГЛАВА 4. ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ИЗГИБА НА ТРАЕКТОРИИ ЗАРЯЖЕННЫХ ЧАСТИЦ В КАНАЛАХ КРИСТАЛЛОВ

В данной главе рассматриваются вопросы применения метода компьютерного моделирования движения быстрых заряженных частиц в плоскостных каналах изогнутых кристаллов. Для учёта изгиба применяется модель эффективного потенциала с центробежной добавкой, действующей на частицу в изогнутом кристалле, предложенная в работе [39] для анализа доли отклонённых изогнутым кристаллом частиц. Кривизна, входящая в выражение для центробежной добавки потенциала находится в рамках теории упругости из решения уравнения равновесия для тонкой пластинки [40].

Также рассматриваются особенности применения методов учёта деканалирования в случае изогнутого кристалла. Так, при отборе деканализированных частиц по потерям энергии на электронах число деканализированных частиц и интенсивность центробежного деканализирования больше, чем при методах отбора по поперечным координатам и скоростям.

Для компьютерного моделирования был выбран проведённый в 1993 году эксперимент по отклонению протонов с энергией 450 ГэВ изогнутым кристаллом кремния [4]. По результатам указанного эксперимента вышло множество публикаций, сообщалось о достигнутой высокой эффективности отклонения протонного пучка.

4.1. Влияние изгиба кристалла на траектории каналированных частиц

На выходе из прямого кристалла каналированные и рассеянные частицы движутся вместе. Их пространственное разделение возможно с применением изогнутого кристалла. При движении быстрых заряженных частиц через слабо изогнутый кристалл часть их поворачивается (отклоняется), следуя за изгибом кристалла, а остальные движутся в первоначальном направлении. В настоящее время это свойство широко используется, например, для управления пучками заряженных частиц. В связи с чем, актуальными являются ис-

следования эффективности отклонения частиц кристаллами. Экспериментальные исследования показали, что при движении через изогнутый кристалл частица может испытывать как деканализирование, вследствие действия центробежной силы, так и наоборот, объёмный захват в каналы.

4.1.1. Эффективный потенциал

Рассмотрим движение быстрой заряженной частицы в изогнутом кристалле. Пусть частица с энергией E_0 и импульсом $\vec{p}_0 = m \cdot \vec{v}_0$ влетает в изогнутый кристалл в плоскости XZ под малым углом $\theta_0 = p_x / p_z$ к оси Z (здесь m – релятивистская масса частицы, \vec{v}_0 – её скорость, p_x и p_z – соответственно поперечная и продольная составляющие импульса \vec{p}_0 частицы).

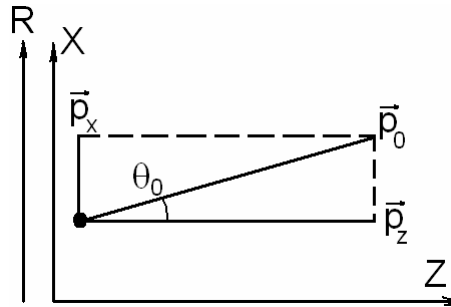


Рис. 4.1. Схема движения быстрой заряженной частицы в изогнутом кристалле.

Изгиб кристалла производится в направлении оси X , т.е. угол изгиба плоскостных каналов равен углу изгиба кристалла. Если радиус R изгиба плоскостей велик по сравнению с межплоскостным расстоянием d_p , то изгиб не изменит усреднённого потенциала $U(x)$, но приведёт к появлению центробежной силы $F_{ц} = p_z \cdot v_z / R(z)$, заставляющую каналированную частицу двигаться вдоль изогнутого канала. Иными словами, при каналировании в изогнутом кристалле на движущуюся частицу действует дополнительная сила, из-за чего происходит смещение траектории в направлении изгиба. Т.к. частица движется под малым углом θ_0 к оси Z , её поперечное движение можно описывать с помощью непрерывного потенциала плоскостного канала.

Для описания движения каналированных частиц в электрическом поле изогнутого кристалла применяют эффективный потенциал канала:

$$U_{\text{эф}}(x) = U(x) + p\nu x / R,$$

где: $U(x)$ – потенциал прямого кристалла, $\nu \approx \nu_z$, т.к. угол θ_0 мал, $\nu_z = z \cdot t$.

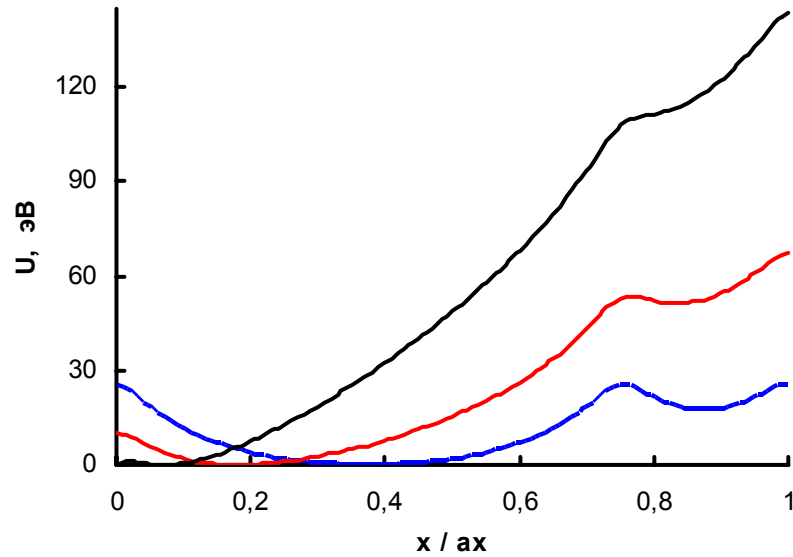


Рис. 4.2. Эффективный потенциал при $R = 250$ см (сплошная красная линия), $R = 100$ см (верхний график) и потенциал неизогнутого кристалла для протонов с энергией 450 ГэВ в (111) плоскостном канале кристалла кремния в приближении Мольер.

Уравнение поперечного движения частиц в изогнутом по радиусу R кристалле:

$$p\nu \frac{d^2x}{dt^2} + \frac{\partial U_{\text{эф}}}{\partial x} = 0$$

Перепишем уравнение с учётом эффективного потенциала:

$$\begin{aligned} p\nu \frac{d^2x}{dt^2} + \frac{\partial [U(x) + p\nu \cdot x/R]}{\partial x} &= p\nu \frac{d^2x}{dt^2} + \frac{\partial U(x)}{\partial x} + \frac{\partial [p\nu \cdot x/R]}{\partial x} = \\ &= p\nu \frac{d^2x}{dt^2} + \frac{\partial U(x)}{\partial x} + \frac{p\nu}{R} \frac{\partial x}{\partial x} = 0 \end{aligned}$$

$$\text{или } \frac{d^2x}{dt^2} = -\frac{1}{p\nu} \frac{\partial U}{\partial x} - \frac{1}{R} = -\frac{1}{p\nu} \frac{\partial U}{\partial x} - k,$$

где: $k = 1/R$ – кривизна кристалла.

В результате решения уравнения движения получаются траектории частиц, колеблющиеся относительно центра, смещённого в направлении радиуса.

При изгибе кристалла минимум потенциала смещается из центра в сторону изгиба, что приводит к смещению траекторий каналированных частиц к стенкам каналов (смещение центра колебаний) и при этом уменьшается глубина потенциальной ямы – это является объяснением явления центробежного деканализирования. Эффективный потенциал зависит от радиуса изгиба и энергии движущихся частиц. Очевидно, что при неизменном радиусе изгиба кристалла, деканализирование, вызванное действием центробежной силы будет увеличиваться с увеличением энергии движущихся частиц. Для каждой конкретной энергии движущихся частиц можно найти свой критический радиус изгиба R_c , при превышении которого движущиеся частицы будут деканализировать.

$$R_c = p v / U_x(x_c),$$

где: x_c – поперечная координата, соответствующая границе "рабочей области" канала; $U_x(x_c) = \partial U / \partial x|_{x=x_c}$ – производная от потенциала прямого кристалла в точке $x = x_c$. Отметим, что в точке $x = x_c$ U_x принимает максимальное значение. Таким образом, формулу для нахождения радиуса Цыганова можно записать:

$$R_c = p v / U_{x \max}.$$

В случае неравномерного изгиба кристалла необходимо учитывать изменение кривизны с глубиной $k(t) = 1/R(t)$. В кристалле, изогнутом неравномерно, на участке с нарастающей кривизной определённая доля пучка частиц выбывает из режима каналирования за счёт механизма центробежного деканализирования. В изгибающих устройствах с тремя опорами кривизна изгиба меняется по всей длине изогнутой части кристалла: кривизна изгиба линейно увеличивается от нуля до k_{\max} на участке между первой и второй (центральной

ной) опорами, а далее – до третьей опоры – линейно уменьшается до нуля. Центробежное деканалирование происходит в этом случае на всём протяжении участка кристалла с нарастающей кривизной и представляет собой длительный процесс, обусловленный постепенным уменьшением глубины эффективной потенциальной ямы и смещением траекторий частиц к внешней стенке канала. В [41] показано, что в гармоническом приближении доля деканализованных частиц для участка с линейно увеличивающейся кривизной растёт линейно с глубиной $N_{\text{дек}} = I_{\text{дек}} \cdot t$. Постоянную $I_{\text{дек}}$ можно назвать интенсивностью центробежного деканализованного. В ходе компьютерного моделирования прохождения протонов через изогнутый кристалл кремния было обнаружено, что указанная линейная зависимость сохраняется только до глубины, на которой кривизна кристалла становится больше критического значения.

4.1.2. Способы изгиба кристалла

Используемые на практике способы изгиба кристаллов и изгибные устройства различаются по способу создания изгиба и по виду кривизны.

Например, постоянную кривизну кристалла можно получить следующими способами:

- “О” – кристаллы – кристаллы U – образной формы, обеспечивающие равномерный изгиб рабочей области путём сжатия ножек.

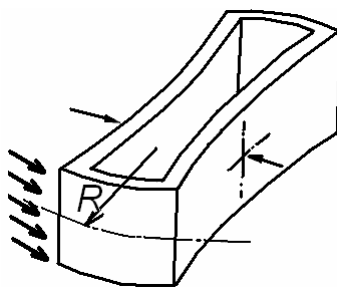


Рис. 4.3. Схема “О” – кристалла [42].

- “П” – кристаллы – основаны на анизотропных свойствах кристаллических решеток. При изгибе тонкой полоски кристалла по высоте в поперечном на-

правлении возникают деформации, принимающие седлообразную форму. Таким образом можно получить изогнутые кристаллы небольшой длины.

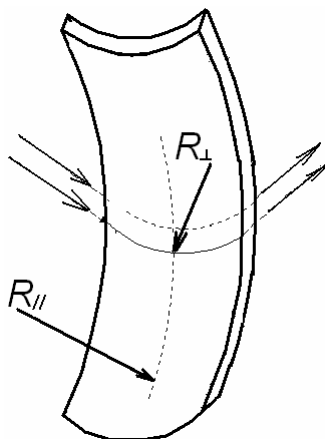


Рис. 4.4. Схема “П” – кристалла [8].

- Кристаллы с нанесённым слоем оксида металла. Изгиб создаётся за счёт теплового расширения нанесённой полоски.

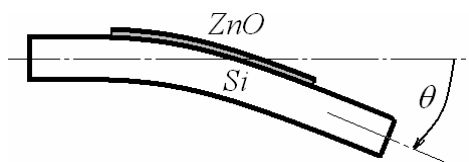


Рис. 4.5. Схема изгиба кристалла с нанесённым оксидом металла [43].

Неравномерный изгиб создаётся в трёх и четырёхточечных изгибных устройствах.

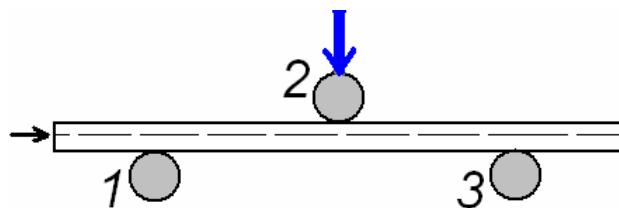


Рис. 4.6. Схема трёхточечного изгибного устройства

Трёхточечное изгибное устройство состоит из трёх прижимов-роликов, между которыми помещается пластинка кристалла. Первый и третий прижимы неподвижные, а второй (центральный) с помощью винта оказывает необходимое давление на пластинку кристалла, регулируя кривизну изгиба. Обычно расстояния между первым – вторым и вторым – третьим роликами одинаковые, при этом кривизна между первым и вторым прижимами кривиз-

на увеличивается как $k(t) = a_k \cdot t$ ($a_k = \text{const}$ – угловой коэффициент), а между вторым и третьем прижимами – уменьшается $k(t) = -a_k \cdot t$.

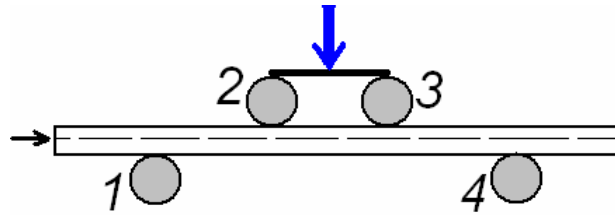


Рис. 4.7. Схема четырёхточечного изгибного устройства [44].

При четырёхточечном изгибе область линейного увеличения кривизны находится между первым и вторым прижимами, область линейного уменьшения кривизны – между третьим и четвёртым прижимами, а центральная область (между вторым и третьим прижимами) – область с постоянной кривизной.

В ходе экспериментальных исследований было обнаружено, что в области прилегания прижима к пластинке кристалла происходит резкое деканалирование частиц, движущихся в каналах слоёв со стороны прижима. Для слоёв, удалённых от прижима – в центре пластинки кристалла и далее это деканалирование почти отсутствует. Объясняется это следующим образом: прижим-ролик давит на кристалл, вызывая в нём местные деформации.

4.1.3. Уравнение деформации

В практически реализованных случаях изгиб кристалла производился на небольшой угол (~мкрад), что соответствует радиусу изгиба порядка 1 метра, сам кристалл представляет собой пластинку, шириной около 1 см, высотой 0.5 см, длиной от нескольких мм до нескольких см. Т.е. деформации таких кристаллов незначительны и являются упругими. Для компьютерного моделирования учитывать кривизну кристалла будем с помощью решения уравнения для упругих смещений.

Под влиянием приложенных сил твёрдые тела в той или иной степени деформируются, т.е. меняют свою форму и объём. Для математического описания деформации тела положение каждой точки тела определяют её радиусом-вектором \vec{r} (с компонентами $x_1 = x$, $x_2 = y$, $x_3 = z$) в некоторой системе

координат. При деформировании тела все точки будут смещаться. Рассмотрим какую-нибудь определённую точку тела; если её радиус-вектор до деформирования был \vec{r} , то в деформированном теле он будет иметь некоторое другое значение \vec{r}' (с компонентами x'_i). Смещение точки тела при деформировании изобразится вектором $\vec{r}' - \vec{r}$, который обозначается буквой $\vec{\zeta}$: $\zeta_i = x'_i - x_i$.

Вектор $\vec{\zeta}$ называют вектором деформации (или вектором смещения). Координаты x'_i смещённой точки являются функциями от координат x_i той же точки до смещения. Поэтому и вектор деформации является функцией координат x'_i . Задание вектора $\vec{\zeta}$ как функции от x_i полностью определяет деформацию тела.

При деформировании тела меняются расстояния между его точками. Рассмотрим какие-нибудь две бесконечно близкие точки. Если радиус-вектор между ними до деформирования был dx_i , то в деформированном теле радиус-вектор между теми её двумя точками будет $dx_i = dx_i + d\zeta_i$. Само расстояние между точками до деформирования было равно $dl = \sqrt{dx_1^2 + dx_2^2 + dx_3^2}$, а после деформирования $dl' = \sqrt{dx_1'^2 + dx_2'^2 + dx_3'^2}$.

Пластинка является тонкой, если её толщина мала по сравнению с размерами в двух других направлениях. Деформации считаются малыми; критерием малости деформации является малость смещений точек пластинки по сравнению с её толщиной. При сгибании пластинки внутри неё в некоторых местах возникают растяжения, в других – сжатия. На выпуклой стороне пластинки происходит растяжение; по мере углубления в толщу пластинки это растяжение постепенно уменьшается, достигая в конце концов нуля, вслед за чем в дальнейших слоях начинается постепенно увеличивающееся сжатие. Таким образом, внутри пластинки имеется нейтральная поверхность, на которой растяжение вообще отсутствует, а по двум сторонам её деформация имеет противоположный знак. Очевидно, что эта поверхность расположена по середине толщины пластинки.

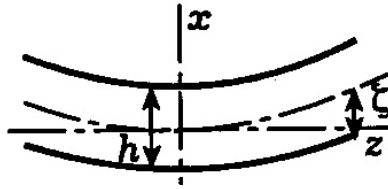


Рис.4.8 Изгиб тонкой пластинки [40].

Выберем систему координат с началом в какой-нибудь точке нейтральной поверхности и осью x , направленной по нормали к ней. Плоскость YZ совпадает с плоскостью недеформированной пластинки. Обозначим вертикальное смещение точек нейтральной поверхности, т.е. их x -координату, буквой ζ . Что касается компонент смещений этих точек в плоскости yz , то они являются, очевидно, величинами второго порядка малости по сравнению с ζ и потому могут быть положены равными нулю. Таким образом, вектор смещения точек нейтральной поверхности:

$$\zeta_z^{(0)} = \zeta_y^{(0)} = 0, \quad \zeta_x^{(0)} = \zeta(y, z).$$

Уравнение равновесия пластинки, изгибаемой действующими на неё силами [40]:

$$D \cdot \frac{d^4 \zeta}{dx^4} = P(x)$$

где: D – коэффициент жёсткости пластинки при изгибе,

$P(x)$ – действующая на пластинку внешняя сила, отнесённая к единице её площади.

Для компьютерного моделирования трёхточечного изгиба были сделаны следующие предположения:

- В эксперименте сила $P(x)$ действует на пластинку только в точках – местах прижима (сила тяжести не учитывается).

- Местные деформации, создаваемые прижимами-роликами не учитываются.

Т.к. сила тяжести не учитывается, то уравнение равновесия для каждого из участков кристалла между прижимами будет:

$$\frac{d^4 \zeta}{dz^4} = 0$$

Это дифференциальное уравнение четвёртого порядка решается интегрированием.

$\zeta = c_1 \cdot z^3 + c_2 \cdot z^2 + c_3 \cdot z + c_4$ - вектор смещения (деформации);

$\frac{d\zeta}{dz} = 3 \cdot c_1 \cdot z^2 + 2 \cdot c_2 \cdot z + c_3$ - первая производная вектора смещения выражает

угол θ изгиба пластинки;

$\frac{d^2\zeta}{dz^2} = 6 \cdot c_1 \cdot z + 2 \cdot c_2$ - вторая производная вектора смещения характеризует

кривизну (именно эта кривизна входит в уравнение движения быстрой заряженной частицы в изогнутом кристалле);

$$\frac{d^3\zeta}{dz^3} = 6 \cdot c_1.$$

Рассмотрим решение уравнения равновесия для случая трёхточечного изгиба. Устройство для трёхточечного изгиба пластинки кристалла можно представить в виде следующей схемы:

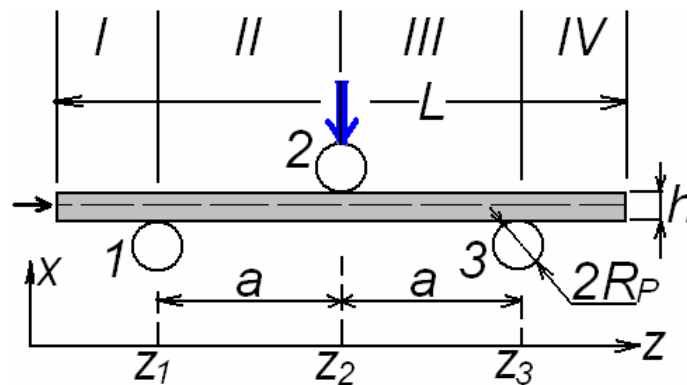


Рис. 4.9 Схема трёхточечного изгиба

h – толщина пластинки

L – длина пластинки

a – расстояние между прижимами-роликами

R_p – радиус прижима-ролика (для расчётов принимается, что $R_p \rightarrow 0$)

Пластинку кристалла можно разделить на четыре области (или участка):

I – от “начала” кристалла до первого прижима и IV – от третьего прижима до “конца” кристалла неизогнутые области ($k = 0$);

II область между первым и вторым прижимами – область с линейно увеличивающейся кривизной;

III область между вторым и третьим прижимами – область с линейно уменьшающейся кривизной.

Т.к. изменение кривизны происходит только областях II и III, то для нахождения вида кривизны надо решить уравнение равновесия (деформации) для этих двух областей. Для решения дифференциального уравнения необходимо знать начальные условия:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d^2 \zeta_{II}(z_1)}{dz^2} = \frac{d^2 \zeta_{III}(z_3)}{dz^2} = 0; \quad \frac{d^2 \zeta(z_2)}{dz^2} = \frac{\theta_{ОБЩ}}{a^2}; \\ \frac{d \zeta_{II}(z_1)}{dz} = -\theta; \quad \frac{d \zeta_{III}(z_3)}{dz} = \theta; \\ \zeta_{II}(z_2) = \zeta_{III}(z_3) = 0 \end{array} \right.$$

Эти условия означают, что вектор смещения в точках z_1 и z_3 равен 0, т.е. пластинка в этих точках жёстко закреплена и не смещается; кривизна в точке z_1 равна 0, кривизна в точке z_2 равна кривизне k_{\max} ; угол изгиба в начале пластинки (z_1) равен 0, в середине пластинки равен среднему углу $\theta = \theta_{ОБЩ}/2$, в конце пластинки (z_3) – углу $\theta_{ОБЩ}$.

$$\left. \frac{d \zeta_{II}}{dz} \right|_{Z=0} = 3 \cdot c_1^{II} \cdot z^2 + 2 \cdot c_2^{II} \cdot z + c_3^{II} = 0$$

$$\left. \frac{d^2 \zeta_{II}}{dz^2} \right|_{Z=0} = 6 \cdot c_1^{II} \cdot z + 2 \cdot c_2^{II} = 0$$

$$\left. \frac{d^2 \zeta_{II}}{dz^2} \right|_{Z=a} = 6 \cdot c_1^{II} \cdot z + 2 \cdot c_2^{II} = \frac{\theta_{ОБЩ}}{a^2}$$

$$\zeta_{II}|_{Z=0} = c_1^{II} \cdot z^3 + c_2^{II} \cdot z^2 + c_3^{II} \cdot z + c_4^{II} = 0 \Rightarrow c_4^{II} = 0$$

решение для II области:
$$\left\{ \begin{array}{l} c_1^{II} = \frac{1}{6} \cdot \frac{\theta_{ОБЩ}}{a^2}; \quad c_2^{II} = 0; \\ c_3^{II} = -\frac{\theta_{ОБЩ}}{2}; \quad c_4^{II} = 0 \end{array} \right.$$

$$\zeta_{II} = \frac{\theta_{ОБЩ}}{a^2} \cdot z^3 - \frac{\theta_{ОБЩ}}{2} \cdot z$$

$$\frac{d\zeta_{II}}{dz} = \frac{3 \cdot \theta_{ОБЩ}}{a^2} \cdot z^2 - \frac{\theta_{ОБЩ}}{2}$$

$$\frac{d^2\zeta_{II}}{dz^2} = \frac{\theta_{ОБЩ}}{a^2} \cdot z$$

$$\frac{d^3\zeta_{II}}{dz^3} = \frac{\theta_{ОБЩ}}{a^2}$$

$$\left. \frac{d\zeta_{III}}{dz} \right|_{Z=2a} = 3 \cdot c_1^{II} \cdot z^2 + 2 \cdot c_2^{II} \cdot z + c_3^{II} = \theta_{ОБЩ}$$

$$\left. \frac{d^2\zeta_{III}}{dz^2} \right|_{Z=2a} = 6 \cdot c_1^{II} \cdot z + 2 \cdot c_2^{II} = 0$$

$$\left. \frac{d^2\zeta_{III}}{dz^2} \right|_{Z=a} = 6 \cdot c_1^{II} \cdot z + 2 \cdot c_2^{II} = \frac{\theta_{ОБЩ}}{a^2}$$

$$\zeta_{II}|_{Z=2a} = c_1^{II} \cdot z^3 + c_2^{II} \cdot z^2 + c_3^{II} \cdot z + c_4^{II} = 0 \Rightarrow c_4^{II} = 0$$

решение для III области:
$$\begin{cases} c_1^{III} = -\frac{1}{6} \cdot \frac{\theta_{ОБЩ}}{a^2}; & c_2^{III} = 0; \\ c_3^{III} = \frac{\theta_{ОБЩ}}{2}; & c_4^{III} = 0 \end{cases}$$

$$\zeta_{III} = -\frac{\theta_{ОБЩ}}{a^2} \cdot z^3 + \frac{\theta_{ОБЩ}}{2} \cdot z$$

$$\frac{d\zeta_{III}}{dz} = -\frac{3 \cdot \theta_{ОБЩ}}{a^2} \cdot z^2 + \frac{\theta_{ОБЩ}}{2}$$

$$\frac{d^2\zeta_{III}}{dz^2} = -\frac{\theta_{ОБЩ}}{a^2} \cdot z$$

$$\frac{d^3\zeta_{III}}{dz^3} = -\frac{\theta_{ОБЩ}}{a^2}$$

Таким образом, изменение кривизны на участке II описывается как

$$k_{II}(z) = \frac{\theta_{ОБЩ}}{a^2} \cdot z,$$

на участке III: $k_{III}(z) = -\frac{\theta_{ОБЩ}}{a^2} \cdot z = -k_{II}(z)$.

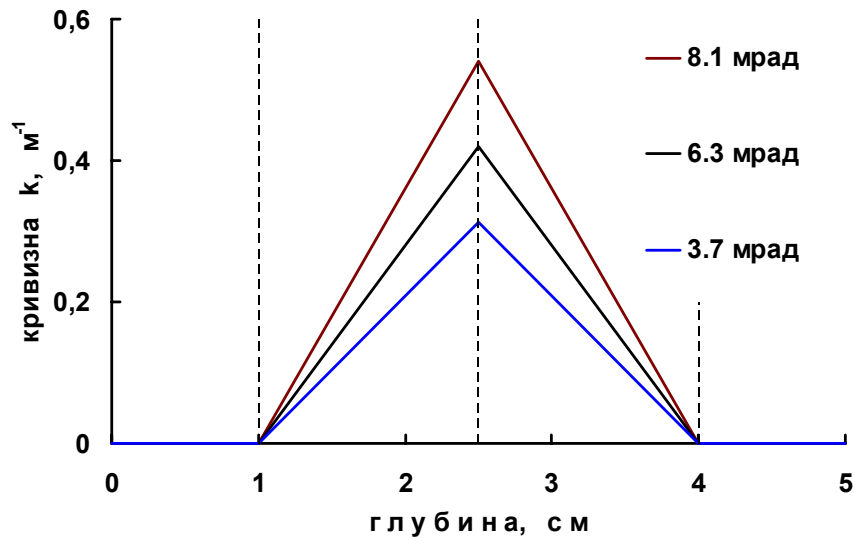


Рис. 4.10. Графики изменения кривизны с глубиной для трёх различных углов изгиба кристалла.

4.2. Экспериментальные данные

В работе [4] описывается эксперимент по отклонению пучка протонов с энергией 450 ГэВ в (111)-плоскостных каналах изогнутого кристалла кремния. Для изгиба кристалла применялось трёхточечное изгибное устройство, позволяющее менять кривизну или радиус изгиба и, тем самым, изменять угол поворота каналированных частиц. Размеры пластинки кристалла $0.9 \times 10 \times 50$ мм, расстояние от начала кристалла до первого прижима 1 см, расстояние между прижимами 1,5 см. В ходе эксперимента были измерены эффективности отклонения частиц при нескольких углах поворота от 1.4 до 11.7 мрад. В результате сообщалось о большой эффективности поворота протонного пучка. Похожие эксперименты проводились на германиевых кристаллах при энергиях протонов 200 и 450 ГэВ, а также планируются исследования при энергиях 400 ГэВ и 7 ТэВ. Результаты таких экспериментов приводятся в сравнении с теоретическими расчётами по теории Эллисона [44]. Необходимо отметить, что теория Эллисона не учитывает многократного рассеяния. Однако эта теория хорошо описывает экспериментальные данные и применяется для оценочных расчётов эффективности поворота.

4.3. Компьютерное моделирование

Для моделирования траекторий быстрых заряженных частиц в изогнутом кристалле применялись компьютерные программы PST и SM с учётом кривизны кристалла. Перепишем основное содержание программы PST для этого случая.

Система уравнений, описывающих эволюцию средних квадратов флуктуаций поперечной координаты и скорости, имеет вид [29]:

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt} \overline{\delta x^2} &= 2 \overline{\delta x \delta \dot{x}} \\ m \frac{d}{dt} \overline{\delta x \delta \dot{x}} &= m \overline{\delta \dot{x}^2} - U_{xx} \overline{\delta x^2} \\ m \frac{d}{dt} \overline{\delta \dot{x}^2} &= -2 U_{xx} \overline{\delta x \delta \dot{x}} + D,\end{aligned}\tag{4.1}$$

где $U_{xx} = \partial^2 U(x) / \partial x^2$; $U = U(x)$ и $D = D(x)$ – непрерывный потенциал и коэффициент диффузии зависят от поперечной координаты, которая является решением уравнения движения

$$m \ddot{x} = -U_x + F(k),\tag{4.2}$$

где m – релятивистская масса; $\dot{x} = dx/dt$; $F(k)$ – центробежная сила, зависящая от кривизны изгиба кристалла, при этом в случае трёхточечного изгиба сама кривизна k является линейной функцией глубины t :

$$k(t) = k_t(t - t_0) = k_t t + k_0.$$

Начальные условия к уравнению (4.2) переопределяются случайным образом (разыгрываются) с помощью решения уравнений (4.1) после прохождения каналированной частицей отрезка траектории, длина которого ограничена неравенствами

$$\overline{\delta x^2}(t) \leq d^2 \cdot 25 \cdot 10^{-4}, \quad \overline{\delta \dot{x}^2}(t) \leq v^2 \cdot \Psi_1^2 \cdot 4 \cdot 10^{-4}, \quad t \geq T_{\min}\tag{4.3}$$

где d – постоянная кристаллической решетки; v – скорость каналированной частицы; $\Psi_1 = (2V_{\max} / mv^2)^{1/2}$ – критический угол каналирования Линдхарда [2].

Запишем систему уравнений (4.1) и (4.2) в безразмерных переменных.

Обезразмерим уравнение движения (4.2).

$$m \frac{d^2 x}{dt^2} = -\frac{\partial U(x)}{\partial x} + p \nu \cdot k(t)$$

Применяя $\tau = \nu \cdot t$, получим:

$$m \nu^2 \frac{d^2 x}{d\tau^2} = -\frac{\partial U(x)}{\partial x} + p \nu \cdot k(\tau) \quad \frac{d^2 x}{d\tau^2} = -\frac{1}{p \nu} \frac{\partial U(x)}{\partial x} + k(\tau)$$

Используем $T_1 = \varepsilon \cdot \tau$:

$$\varepsilon^2 \frac{d^2 x}{dT_1^2} = -\frac{1}{p \nu} \frac{\partial U(x)}{\partial x} + k(T_1)$$

$$\frac{d^2 x}{dT_1^2} = -\frac{1}{\varepsilon^2 \cdot p \nu} \frac{\partial U(x)}{\partial x} + \frac{1}{\varepsilon^2} k(T_1) = -\frac{1}{V_{\max}} \frac{\partial U(x)}{\partial x} + \frac{1}{\varepsilon^2} k(T_1)$$

Перейдём к безразмерным переменным $X = x/d$; $T = T_1/d = \varepsilon \nu \cdot t/d$

$$\frac{1}{d} \frac{d^2 X}{dT^2} = -\frac{1}{d \cdot V_{\max}} \frac{\partial U(X)}{\partial X} + \frac{1}{\varepsilon^2} k(T) \quad \frac{d^2 X}{dT^2} = -\frac{1}{V_{\max}} \frac{\partial U(X)}{\partial X} + \frac{d}{\varepsilon^2} k(T)$$

Система уравнений (4.1) в безразмерных переменных была получена в п. 2.3.2. Теперь можно записать систему уравнений движения, составляющих модель PST для изогнутого кристалла с учётом обезразмеривания переменных:

$$\begin{cases} \frac{d}{dT} V_x = -\frac{1}{V_{\max}} \frac{\partial U(X)}{\partial X} + \frac{d}{\varepsilon^2} k(T); & \frac{d}{dT} X = V_x; \\ \frac{d}{dT} MA = 2 \cdot MB; \\ \frac{d}{dT} MB = MC - \frac{1}{V_{\max}} \frac{\partial^2 U(X)}{\partial X^2} \cdot MA; \\ \frac{d}{dT} MC = \frac{\varepsilon \cdot d}{V_{\max}^2} \cdot D(X) - \frac{2}{V_{\max}} \frac{\partial^2 U(X)}{\partial X^2} \cdot MB. \end{cases} \quad (4.4)$$

Пороговые значения вторых моментов (4.3) в безразмерных переменных запишутся: $MA_{\max} = 25 \cdot 10^{-4}$, $MC_{\max} = 4 \cdot 10^{-4}$.

4.4. Результаты моделирования и выводы

Расчёты проводились для пучка из 301 протона с энергией 450 ГэВ в (111) плоскостном канале кристалла кремния. Начальные значения точки влёта были равномерно распределены на интервале $0 \leq x/a_x \leq 1$, $a_x = d/\sqrt{3}$, т.е. заселялся один плоскостной канал; углы влёта были нормально распределены вокруг среднего значения $V_x = 0$ со среднеквадратичным отклонением, равным 3 мкрад. Условия розыгрыша траекторий для программ PST и SM были одинаковыми, $T_{min} = 750 \text{ \AA}$. Были рассчитаны случаи изгиба кристалла на углы 1.4, 2.4, 3.7, 4.7, 6.3, 8.1, 8.9, 9.8, 11.7 мрад по моделям XV, SM и PST.

Деканализирование рассчитывалось по трём моделям – методами отборов по потерям энергии, по поперечным координатам и по поперечным скоростям. В случае применения отбора частиц по потерям энергии мы получили завышенные значения деканализирования на II участке изогнутого кристалла, а именно, начиная с угла изгиба 6.3 мрад на II участке изогнутого кристалла все частицы деканализируют, а далее, на III участке число деканализированных частиц немного уменьшается, причём это число зависит от угла изгиба – чем больше угол, тем меньше частиц. Необходимо отметить, что угол изгиба 6.3 мрад соответствует кривизне $k_{c'} \approx k_c/3$, где $k_c = 1/R_c$, $R_c \approx 80 \text{ см}$ – радиус Цыганова для данного случая). Результаты расчётов деканализирования по моделям, связанным с поперечными координатами и скоростями частиц совпадают, однако, на II деканализирование идёт медленнее и уменьшения числа деканализированных частиц на III участке изогнутого кристалла не наблюдается.

На рис.4.11 показаны графики выходов из режима каналирования протонов, рассчитанные по модели XV для случаев изгиба на углы 8.1, 6.3 и 3.7 мрад (линии "1", "2" и "3" соответственно). Деканализированные частицы отбирались по потерям энергии. На I и IV участках изогнутого кристалла количество вышедших частиц сильно не изменяется, на II участке происходит

увеличение выхода частиц. В начале III участка число деканализированных частиц немного уменьшается для углов изгиба 8.1 и 6.3 мрад. Также на рис.4.11 показаны графики изменения кривизны для данных углов изгиба кристалла (линии "1'", "2'" и "3'").

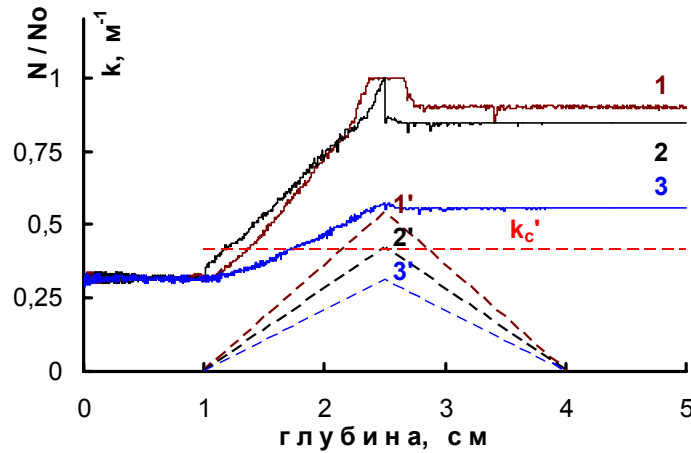


Рис. 4.11 Выходы протонов, рассчитанные методом отбора по потерям энергии. Расчёт траекторий проводился без учёта многократного рассеяния.

Эффект исчезновения каналированных частиц на II и III участках, полученный при отборе деканализированных частиц по потерям энергии можно объяснить тем, что начиная с угла изгиба 6.3 мрад траектории каналированных частиц попадают в область повышенной электронной плотности (см. рис. 4.13). Т.е. в данном случае потери энергии каналированных частиц становятся не меньше потерь энергии в разориентированном кристалле.

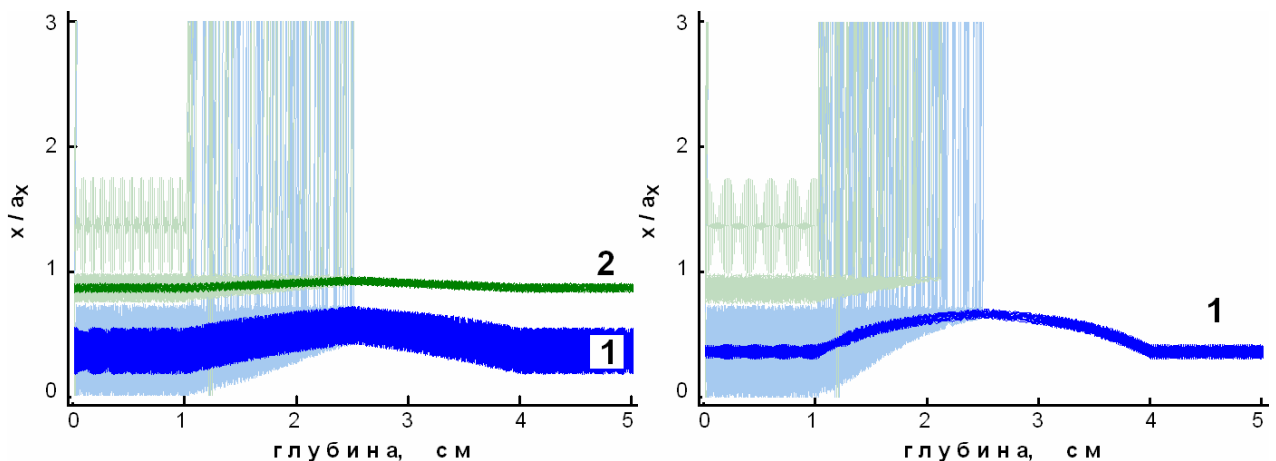


Рис. 4.12 Графики траекторий $x(t)$ в случае изгибов кристалла на углы 4.7 мрад (левый график) и 8.9 мрад, рассчитанные без учёта многократного рассеяния. Траектории частиц, каналирующих в широких (111) плоскостных каналах обозначены "1", в узких каналах — "2".

Можно видеть, что в центре кристалла (конец области II - начало области III) траектории каналированных частиц при угле изгиба кристалла 8.9 мрад колеблются в интервале $x/a_x \approx 0.64 \div 0.72$, что соответствует значениям электронной плотности, больших среднего значения, как показано на рис. 4.13.

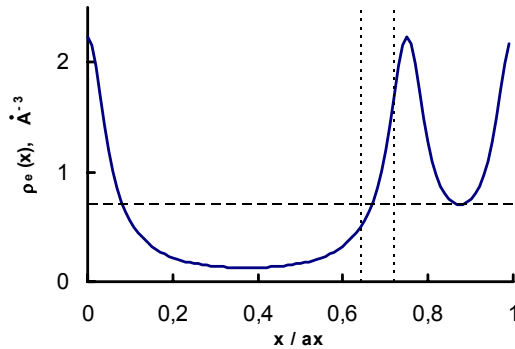


Рис. 4.13 График электронной плотности для протонов с энергией 450 ГэВ в (111) плоскостном канале кристалла кремния.

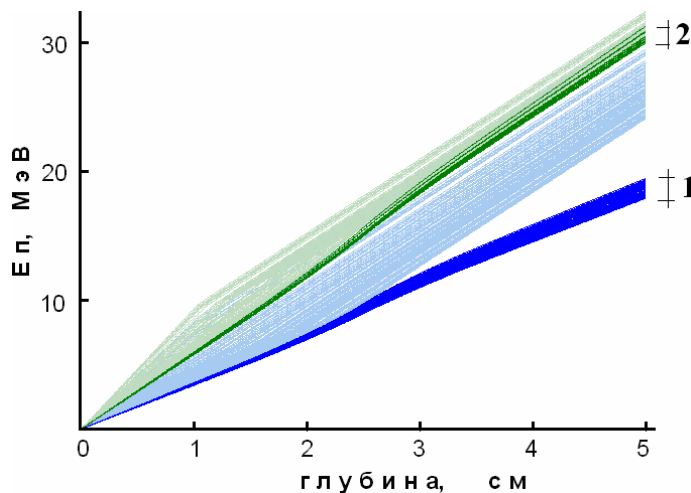


Рис. 4.14 График потерь энергии протонами в кристалле, изогнутом на угол 4.7 мрад, рассчитанные без учёта многократного рассеяния. Потери энергии для частиц, каналирующих в широких (111) плоскостных каналах обозначены "1", в узких каналах - "2". Видно, что наибольшие потери имеют частицы, изначально направленные в узкие каналы.

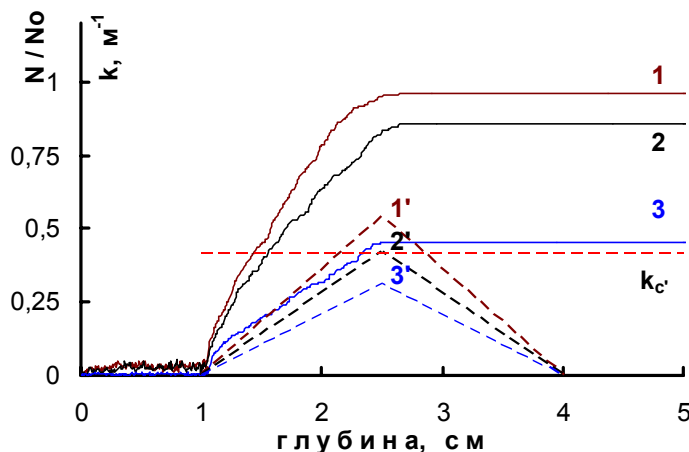


Рис. 4.15 Выходы протонов, рассчитанные методом отбора по поперечным скоростям. Расчёт траекторий проводился по модели PST для случаев изгиба на углы 8.1, 6.3 и 3.7 мрад (линии "1", "2" и "3" соответственно).

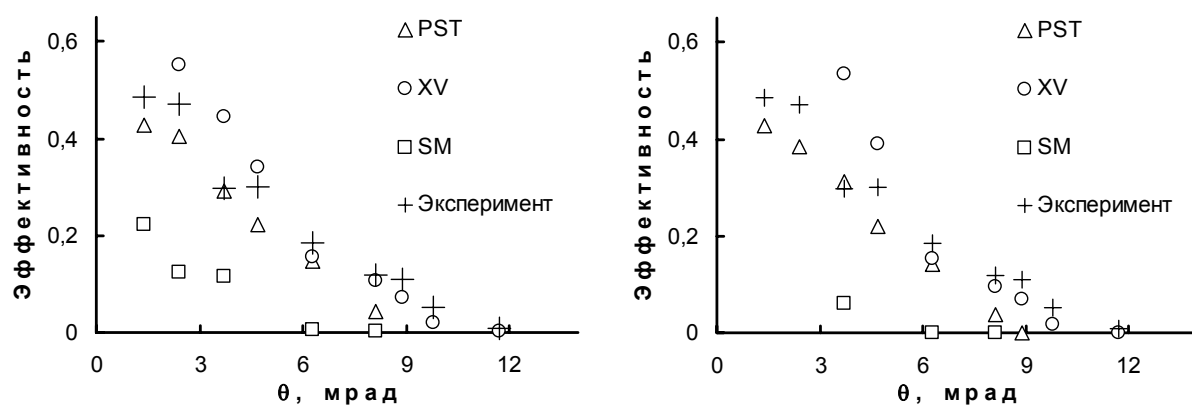


Рис. 4.16 Эффективности отклонения частиц, рассчитанные по модели де-каналирования, связанной с отбором частиц по потерям энергии (левый график) и по модели, связанной с изменением угла.

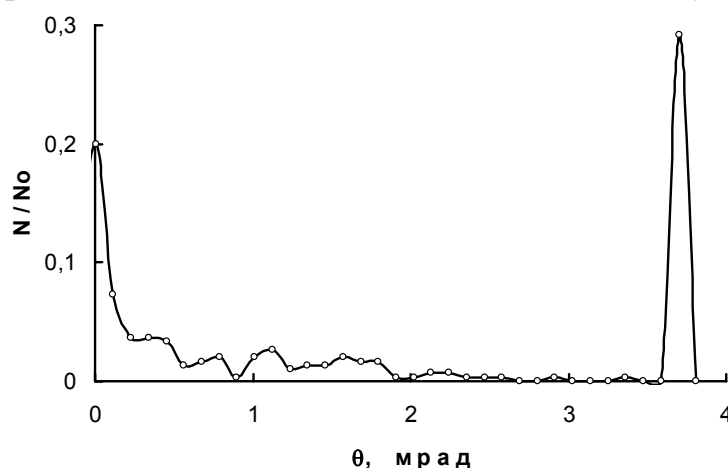


Рис. 4.17 Угловое распределение протонов на выходе из кристалла при изгибе на угол 3.7 мрад. Пик при $\theta = 0$ мрад связан с неканализованными частицами, а при $\theta = 3.7$ мрад – с отклонёнными частицами.

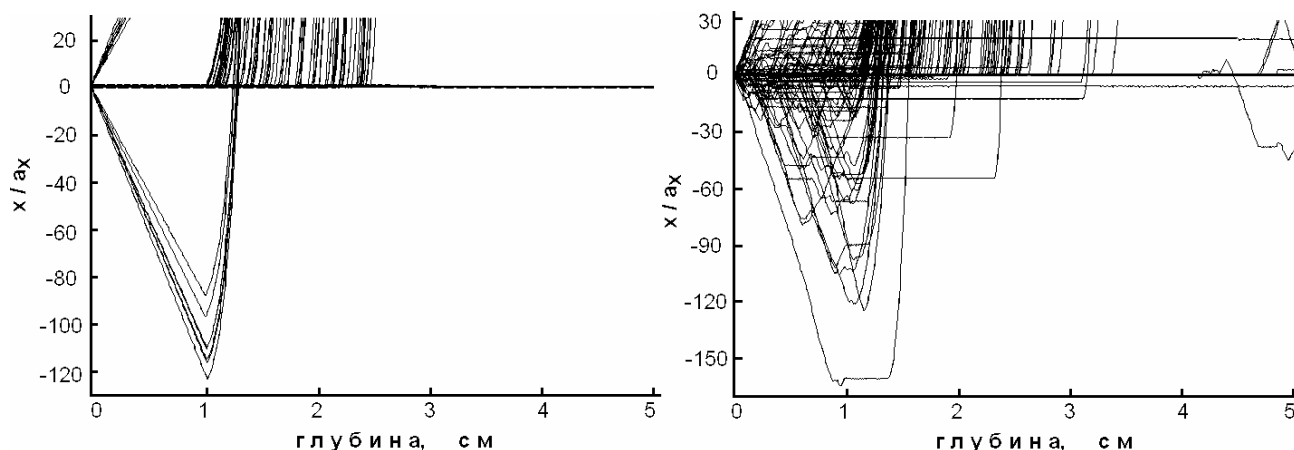


Рис. 4.18 Графики траекторий $x(t)$ в случае изгиба кристалла на угол 2.4 мрад, рассчитанные без учёта многократного рассеяния (левый график) и по модели PST.

На рис. 4.18 приведены графики траекторий в случае изгиба кристалла на угол 2.4 мрад, рассчитанные по моделям XV и PST. Можно видеть, что часть частиц в I области (без изгиба) сильно отклоняется от направления

плоскостного канала – это надбарьерные частицы. При переходе ко второй области кристалла (с изгибом) та часть надбарьерных частиц, которые двигались в сторону отрицательных значений x/a_x поворачивает; этот эффект можно объяснить явлением объёмного отражения. В случае учёта многократного рассеяния можно видеть захваты частиц в каналы – объёмный захват.

Из полученных результатов можно сделать следующие выводы:

1. Обнаружен интервал локальных радиусов изгиба $R_{c'} < R < R_c$, в пределах которого потери энергии каналированных частиц становятся не меньше, чем потери энергии частиц в разориентированном кристалле.
2. Учёт деканалирования в рамках компьютерной программы PST немного уменьшает значения эффективности отклонения по сравнению с результатами расчёта без учёта многократного рассеяния каналированных протонов на электронах и ядрах кристалла (программа XV). Расчёт эффективности отклонения в рамках компьютерной программы SM демонстрирует столь сильное деканалирование из-за многократного рассеяния, что это приводит к значительному расхождению с результатами эксперимента.

Хорошее согласие с экспериментом [4] получено с помощью компьютерной программы PST, что связано с уменьшением скорости деканалирования релятивистских протонов вследствие применения нового подхода к описанию эволюции средних квадратов флуктуаций поперечной координаты и скорости.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Приведём основные результаты работы:

1. Разработана компьютерная программа для исследования движения каналированных ионов в каналах алмазоподобных кристаллов, учитывающую изгиб кристалла, многократное рассеяние, начальную расходимость пучка частиц, различные аппроксимации потенциала отдельного атома.
2. С помощью компьютерного моделирования по предложенной программе были исследованы: динамика потока быстрых частиц (протонов, положительных ионов) в режиме плоскостного каналирования в алмазоподобных кристаллах, влияние потенциала переходной области ось-плоскость, влияния изгиба кристалла на свойства потока каналированных частиц.

По результатам компьютерного моделирования можно сделать следующие основные выводы:

1. Обнаружено уменьшение скорости деканалирования релятивистских положительно заряженных частиц в плоскостных каналах кристалла.
2. Переходная область ось-плоскость не оказывает заметного влияния на характер движения каналированных частиц.
3. В условиях эксперимента (S.P. Møller et al. (1994)) обнаружен интервал локальных радиусов изгиба, в пределах которого потери энергии каналированных частиц становятся не меньше, чем потери энергии частиц в разориентированном кристалле.

В отношении созданной компьютерной программы PST необходимо отметить, что данная версия программы реализована только для алмазоподобных кристаллов и трёх главных кристаллографических плоскостных каналов (100), (110) и (111). Данная версия программы реализована как для тяжёлых положительно заряженных частиц (протонов, ионов), так и для тяжёлых отрицательно заряженных частиц (антипротоны, π^- -мезоны). Однако, схема описания кристалла, применяемая в программе, может быть использована

для описания любых атомных кристаллов, также можно описать и другие плоскостные направления.

Достоверность полученных результатов можно обосновать хорошим согласием с экспериментальными результатами. Для обеспечения точности расчётов были применены такие приёмы, как подбор шага численного решения дифференциальных уравнений таким образом, чтобы соблюдался закон сохранения энергии для подбарьерной траектории без многократного рассеяния, подбор количества членов n_x разложения в ряд Фурье таким образом, чтобы соответствующие функции не изменяли свой вид при увеличении n_x . Однако, для расчётов бралась не большая статистика (100, 301 или 1000 частиц), что, конечно, вносит определённую погрешность и это необходимо учитывать при сравнениях результатов расчётов. К сожалению, взять большее число частиц для расчётов не было возможности, т.к. для этого необходимы как большой объём компьютерной памяти, так и время. Так, например, расчёт одного пучка из 301 протона в изогнутом кристалле, длиной 5 см занимает 36 часов и около 100 Гб памяти.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. M.T.Robinson, O.E.Oen – Computer studies of the slowing down of energetic atoms in crystals // Physical reviews, V.132, N.6, 1963, p.2385-2398.
2. Й.Линдхард – Влияние кристаллической решётки на движение быстрых заряженных частиц // УФН. 1969. Т.99. Вып.2. С.249-296.
3. E.N.Tsyganov – Some aspects of the mechanism of a charge particle penetration through a monocrystal // Preprint Fermilab TM-682. Batavia. 1976. P 1-6.
4. S.P.Moller et al. – Observation of high deflection efficiency and narrow energy loss distributions for 450 GeV protons channeled in a bent silicon crystal // Nucl.Instr.Meth.B. 1994.
5. O.I.Sumbaev – The theory of volume capture by a curved crystal in the channeling regime // Preprint LIYaF-1201. 1986.
6. А.М.Таратин, С.А.Воробьёв – Объёмный захват протонов в режим каналирования в изогнутом кристалле // Журнал технической физики. 1985. Т.55. В.8. С.1598-1604.
7. Yu.M.Ivanov, A.A.Petrinin, V.V.Skorobogatov et al. – Volume reflection of a proton beam in a bent crystal // Physical Review Letters. 2006. PRL 97, 144801 p.1-4.
8. А.Г.Афонин, В.Т.Баранов, В.М.Бирюков и др. – Вывод пучка протонов из ускорителя ИФВЭ с помощью коротких кристаллов кремния // Препринт ИФВЭ 2003-33. Протвино, 2003. 49с.
9. A.Baurichter, C.Biino, M.Clément et al. – Channeling of high-energy particles in bent crystals – Experiments at the CERN SPS // Nucl.Instr.Meth. in Phys.Res. B164-165. 2000. p.27-43.
10. А.М.Таратин – Каналирование частиц в изогнутом кристалле // ЭЧАЯ. 1998. Т.29. Вып.5. С.1063-1118.

11. В.М.Бирюков, В.И.Котов, Ю.А.Чесноков – Управление пучками заряженных частиц высоких энергий при помощи изогнутых монокристаллов // УФН. 1994. Т.164. N.10. С.1017-1040.
12. В.Г.Барышевский // Письма в ЖТФ. 1979 Т.5. С.182.
13. М.А.Кумахов – Излучение каналированных частиц в кристаллах. М.: Энергоатомиздат. 1986. 161с.
14. A.G.Wagh, J.Williams, E.Uggerhøj – The effect of planar oscillations on the impurity yield in the backscattered He⁺ spectrum // Труды VII Международной конференции по атомным столкновениям в твердых телах. Т.2. – М.: Изд-во Московского ун-та., 1980. – с.222.
15. K.Saitoh – Surface oscillations and statistical equilibrium of planar channeling // Journal of the Physical Society of Japan. 1985. Vol.54. No.9. p.3615-3621.
16. G.P.Pokhil, A.F.Tulinov, A.A.Turinge et al. – A planar channeling technique to study the structure of the complexes formed by arsenic in silicon at high arsenic concentrations // Nucl.Instr.Meth. in Phys.Res. B13, 1986, p.84-86.
17. F.Abel, G.Amsel, M.Bruneaux et al. – Backscattering study and theoretical investigation of planar channeling processes. I. Experimental results // Physical Review B. 1975. V.12. N.11. p.4617-4627.
18. U.I.Uggerhøj, H.Blühme, H.Knudsen et al. – Channeling of antiprotons // Nucl.Instr.Meth. in Phys.Res. B207, 2003, p.402-408.
19. Yu.V.Bulgakov – Phenomena observable in the transition from axial to planar channeling // Труды VII Международной конференции по атомным столкновениям в твёрдых телах. Т.1.-М.: Изд.-во Московского университета, 1981. С.41-43.

20. W. Assmann, H. Huber, S. A. Karamian et al. – Transverse cooling or heating of channeled ions by electron capture and loss // Physical Review Letters. 1999. V. 83. N. 9. P. 1759-1762.
21. Ю. В. Мартыненко // ФТТ. 1971. Т. 13. N. 4. с. 1055.
22. M. Kitagawa, Y. H. Ohtsuki – Modified dechanneling theory and diffusion coefficients // Phys. Rev. B. 1973. V. 8. N. 7. P. 3117-3123.
23. В. А. Базылев, В. И. Глебов, В. В. Головизнин – Квантовая теория неупругого рассеяния отрицательно заряженных частиц в ориентированных кристаллах // ЖЭТФ. 1986. Т. 91. В. 1(7). с. 25-36.
24. М. А. Кумахов, Г. Ширмер - Атомные столкновения в кристаллах. М.: Атомиздат, 1980. 192 с.
25. S. K. Andersen et al. – Influence of channeling on scattering of 2-15 GeV/c protons, π^+ , and π^- incident on Si and Ge crystals // Nuclear Physics B167, 1980, p. 1-40.
26. К. В. Гардинер – Стохастические методы в естественных науках: Пер. с англ. – М.: Мир. 1986. – 528 с.
27. А. Найфе – Введение в методы возмущений. М.: Мир, 1984.
28. Ч. Киттель - Введение в физику твёрдого тела. М.: Наука, 1978. 701 с.
29. В. П. Кошечев - Ланжевеновский подход к теории каналирования. Сургут: СурГУ, 2001.
30. J. F. Bak et al. – Measurement of average electron densities in Si and Ge using MeV δ -rays produced by channeled high-energy projectiles // Nuclear Physics A389, 1982, p. 533-566.
31. В. А. Рябов - Эффект каналирования. М.: Энергоатомиздат, 1994. 240 с.
32. F. Scheuter, H. Hofmann – On propagation of a fissioning system across the barrier towards scission // Nuclear Physics A394, 1983, p. 477-500.
33. В. П. Кошечев // Известия вузов. Физика. №10, 1999, с. 73-74.

- 34.D.S.Gemmell – Channeling and related effects in the motion of charged particles through crystals // Reviews of Modern Physics, V.46, N.1, 1974. p.129-227.
- 35.J.F.Bak et al. – Detailed investigation of the channeling phenomena involved in bending of high-energy beams by means of crystals // Nuclear Physics B242, 1984, p.1-30.
- 36.V.Biryukov – Computer simulation of beam steering by crystal channeling // Physical Reviews. E. 1995. V. 51. N. 4. P. 3522-3528.
- 37.J.P.Biersak, J.F.Zeigler - SRIM-2003.26 // www.SRIM.org
- 38.Е.Х. Оцуки. - Взаимодействие заряженных частиц с твёрдыми телами. М.: Мир, 1985. 277 с.
- 39.В.В.Каплин, С.А.Воробьёв // Письма в ЖТФ. 1978, Т4, В4, С.196.
- 40.Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. - Теоретическая физика. Том.6. Теория упругости, М.: Физматлит, 2001.
- 41.W.M.Gibson et.al. – Deflection of high energy channeled charged particles by elastically bent silicon single crystal // Nucl.Inst.Meth. in Phys.Res. 1984. V.B2. P.54-59.
- 42.H.Akbari, X.Altuna et al. // Phys. Lett. B.313. 491. 1993.
- 43.J.S.Forester et al. – Channeling // Nuclear Physics B318, 1989, p.302-318.
- 44.J.A.Ellison et.al. – GeV channeling in bent crystals with slowly varying curvature // Nucl.Inst.Meth. in Phys.Res. 1984. V.B2. P.9-12.
- 45.В.П. Кощев, Д.А. Моргун, А.К. Холодов, Н.В. Сафин, Е.В. Кулясов - Потенциальная энергия взаимодействия быстрых ионов с атомами кристалла // Сборник научных трудов СурГУ, 2005. – с.61-65
- 46.В.П.Кощев, Д.А.Моргун, А.К.Холодов, Н.В.Сафин, Е.В.Кулясов - Потенциальная энергия взаимодействия быстрых ионов с атомами кристалла // Тезисы докладов XXXIV международной конференции по фи-

- зике взаимодействия заряженных частиц с кристаллами Под ред. Проф. А.Ф.Тулинова, -М.: Изд-во УНЦ ДО - 2004. - с.37.
47. Н.В.Сафин - PST – модель расчёта траекторий релятивистских частиц // “Наука и инновации XXI века” Материалы открытой окружной конференции молодых ученых. 24-25 ноября 2005 года СурГУ. 2005. с.31-32.
48. В.П. Кощев, Д.А. Моргун, Н.В. Сафин, А.К. Холодов - Компьютерное моделирование траекторий каналированных ионов // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. – 2006. – №7. – с.48-51.
49. Н.В. Сафин, В.П. Кощев, Д.А. Моргун - Моделирование траекторий каналированных ионов в фазовом пространстве // Сборник тезисов: Труды семнадцатой международной конференции “Взаимодействие ионов с поверхностью (ВИП-2005)”, 25-29 августа 2005 г. Звенигород, Россия, Т.1. с.301-304.
50. В.П. Кощев, Д.А. Моргун, Н.В. Сафин, А.К. Холодов - Бесстолкновительный нагрев и охлаждение каналированных ионов в переходной области ось-плоскость // Сборник научных трудов. Выпуск 23. Физико-математические и технические науки. Сургут: Изд-во СурГУ. 2005. – с.55-60.
51. В.П.Кощев, Д.А.Моргун, Н.В.Сафин, А.К.Холодов - Бесстолкновительный нагрев и охлаждение каналированных ионов в переходной области ось-плоскость // Тезисы докладов XXXIV международной конференции по физике взаимодействия заряженных частиц с кристаллами Под ред. Проф. А.Ф.Тулинова, -М.: Изд-во УНЦ ДО - 2004. - с.36.
52. Н.В.Сафин, В.П.Кощев - Деканалирование ионов гелия в переходной области ось-плоскость кристалла кремния // Наука и инновации XXI века: Материалы V открытой окружной конференции молодых ученых. 25-26 ноября 2004 года СурГУ.- 2004.- с.18-19.

53. Н.В.Сафин, В.П.Кошечев, Д.А.Моргун - Деканалирование ионов в переходной области ось-плоскость // Тезисы докладов XXXV международной конференции по физике взаимодействия заряженных частиц с кристаллами Под ред. Проф. А.Ф.Тулинова, -М.: Изд-во УНЦ ДО. - 2005. - с.43.
54. В.П.Кошечев, Д.А.Моргун, Н.В.Сафин, А.К.Холодов - Флуктуационный механизм потерь энергии каналированных ионов // Тезисы докладов XXXV международной конференции по физике взаимодействия заряженных частиц с кристаллами Под ред. Проф. А.Ф.Тулинова, -М.: Изд-во УНЦ ДО - 2005. - с.42.
55. V.P. Koshcheev, D.A. Morgun, A.K. Kholodov, N.V. Safin - Stopping power of fast ions in planar channeling // Sixth International Symposium on Swift Heavy Ions in Matter, May 28-31, 2005, Aschaffenburg (Germany). – 2005. – p.58.
56. В.П. Кошечев, А.К. Холодов, Н.В. Сафин, Д.А. Моргун - Флуктуационно-динамическое описание потерь энергии быстрых ионов в плоскостных каналах кристалла // Сборник тезисов: Труды семнадцатой международной конференции “Взаимодействие ионов с поверхностью (ВИП-2005)”, 25-29 августа 2005 г. Звенигород, Россия, Т.1. с.274-276.
57. В.П. Кошечев, Д.А. Моргун, Н.В. Сафин, А.К. Холодов - Флуктуационно-динамическое описание потерь энергии быстрых ионов в плоскостных каналах кристалла // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования.– 2006 – №10.– с.1-3.
58. В.П.Кошечев, Д.А.Моргун, Н.В.Сафин, А.К.Холодов - Механизм уменьшения плоскостного деканалирования релятивистских протонов // Письма в ЖТФ. – 2006. – Т.32. – В.9. – с.1-6.
59. Н.В.Сафин - Движение быстрых протонов в изогнутом кристалле // Наука и инновации XXI века: Материалы открытой окружной конфе-

ренции молодых ученых. 27-28 ноября 2003 года СурГУ. 2003 - Т.1 - с.31-33.

60.Н.В. Сафин, Д.А. Моргун, В.П. Кощев - Отклонение протонов изогнутым кристаллом кремния // Сборник научных трудов. Выпуск 24. Физико-математические и технические науки. Сургут: Изд-во СурГУ. 2006. в печати.

61.Н.В. Сафин, Д.А. Моргун, В.П. Кощев - Компьютерное моделирование спектра потерь энергии протонов в изогнутом кристалле кремния // Тезисы докладов XXXVI международной конференции по физике взаимодействия заряженных частиц с кристаллами Под ред. Проф. А.Ф.Тулинова -М.: Изд-во УНЦ ДО - 2006. – с.36.

62.Е.В. Кулясов, Н.В. Сафин, Д.А. Моргун, В.П. Кощев - Компьютерное моделирование спектральной интенсивности излучения при каналировании релятивистских электронов в (100) плоскости кристалла алмаза // Сборник научных трудов. Выпуск 24. Физико-математические и технические науки. Сургут: Изд-во СурГУ. 2006. в печати.

63.Е.В. Кулясов, Н.В. Сафин, Д.А. Моргун, В.П. Кощев - Компьютерное моделирование спектральной интенсивности излучения релятивистских электронов в переходной области ось-плоскость // Тезисы докладов XXXVI международной конференции по физике взаимодействия заряженных частиц с кристаллами Под ред. Проф. А.Ф.Тулинова, -М.: Изд-во УНЦ ДО - 2006. – с.72.