

01;05;10

## Критические параметры каналирования

© С.И. Матюхин

Орловский государственный технический университет,  
302020 Орел, Россия  
e-mail: sim1@mail.ru

(Поступило в Редакцию 25 июня 2007 г.)

Представлен обзор основных методов расчета критических параметров каналирования, которые играют определяющую роль в проблеме деканалирования ионов. Получены справедливые в широком диапазоне энергий частиц аналитические выражения для пороговой энергии каналирования, критической поперечной энергии, для расстояния наибольшего сближения частиц с образующими каналы атомными цепочками или плоскостями и критических углов осевого и плоскостного каналирования. Проанализирована зависимость критических параметров каналирования от температурных кристаллов.

PACS: 61.85.+p, 85.40.Ry, 29.27.Eg

### Введение

В настоящее время явление каналирования ионов, возникающее при ориентированном взаимодействии этих частиц с атомами кристаллов [1–5], широко используется для исследования состава и структуры твердых тел [5,6], при разработке эффективных систем управления пучками высоких энергий [7], а также для модификации свойств традиционных для электроники и микроэлектроники кристаллических материалов методом ионной имплантации [8–10]. В последние годы существенно вырос практический интерес к эффекту каналирования ионов в углеродных нанотрубках [11]. Между тем в теории этого явления до сих пор существует ряд нерешенных проблем, среди которых можно выделить проблему адекватного аналитического описания каналирования и деканалирования ионов низких энергий.

Основным препятствием для этого является необходимость учета множества связанных между собой факторов (например, потерь полной энергии ионов и рассеяния, которое приводит к росту их поперечной энергии), а также сложная зависимость критических параметров каналирования от полной энергии частиц.

В настоящей работе представлен обзор основных методов расчета этих параметров и проведено исследование их энергетической зависимости для ионов, захваченных в осевые или плоскостные каналы кристаллов.

В работе получены справедливые в широком диапазоне энергий частиц аналитические выражения для пороговой энергии каналирования, критической поперечной энергии, для расстояния наибольшего сближения частиц с образующими каналы атомными цепочками или плоскостями и критических углов осевого и плоскостного каналирования. Показано, что для ионов низких энергий основным фактором, определяющим эти величины, является параметрическая неустойчивость их движения. При этом учет конечности поперечных размеров каналов приводит к появлению максимума в зависимости критического угла от энергии и обращению его в нуль при энергии частиц, меньшей пороговой энергии.

Проанализирована зависимость критических параметров каналирования от температуры кристаллов. Показано, что для ионов низких энергий этой зависимостью можно пренебречь.

### 1. Критические параметры каналирования, рассчитанные исходя из критерия потери корреляций Линдхарда

Как известно, впервые представления о критических параметрах каналирования были введены Линдхардом в его основополагающей работе [1] по теории этого явления. Используя приближение непрерывных потенциалов атомных цепочек и плоскостей, он показал, что движение любой каналированной частицы можно разложить на продольное, параллельное оси канала, и поперечное, перпендикулярное ей. Оказалось, что при описании эффекта каналирования можно ограничиться рассмотрением только поперечного движения частиц.

В приближении статической атомной цепочки [1] энергия  $E_{\perp}$  поперечного движения определяется выражением

$$E_{\perp} = E \sin^2 \psi + U(r) \approx E\psi^2 + U(r), \quad (1)$$

где  $E$  — полная энергия частицы,  $\psi$  — угол между вектором ее скорости и атомной цепочкой ( $\psi \ll 1$ ),  $U(r)$  — непрерывный потенциал цепочки на расстоянии  $r$  от нее.

Из-за дискретности цепочек эта энергия ограничена сверху величиной критической энергии  $E_{\perp L}$ , по достижении которой частица выходит из режима каналирования (деканалирует) вследствие потери корреляций при столкновениях с атомами кристалла. При этом, приближаясь к цепочке на минимально возможное расстояние  $r_L$ , частица покидает канал после рассеяния на большой угол при однократном взаимодействии с одним из атомов кристалла.

Критерий потери корреляций был выведен Линдхардом из условия сохранения поперечной энергии частиц и имеет вид [1]:

$$\frac{d^2 U''(r_L)}{8E} = 1, \quad (2)$$

где  $d$  — период цепочки, а  $U^*(r_L)$  — значение второй производной от непрерывного потенциала  $U(r)$  на расстоянии наибольшего сближения  $r_L$  с цепочкой.

Найденное из условия (2) расстояние наибольшего сближения  $r_L$  определяет область применимости приближения непрерывного потенциала  $U(r)$  и величину критической поперечной энергии  $E_{\perp L}$ :

$$E_{\perp L} = U(r_L). \quad (3)$$

С понятиями расстояния наибольшего сближения и критической поперечной энергии тесно связано и понятие критического угла каналирования  $\psi_L$ , введенное Линдхардом в той же работе [1] и определяемое уравнением:

$$E\psi_L^2 = E_{\perp L}. \quad (4)$$

Ставшие общепринятым явные выражения для критического угла осевого каналирования получаются путем совместного решения уравнений (2)–(4) с использованием стандартного потенциала цепочки [1]:

$$\psi_L(E) \approx \begin{cases} \left( \frac{2Z_1 Z_2 e^2}{dE} \right)^{1/2}, & E > \frac{2Z_1 Z_2 e^2 d}{a_{TF}^2}, \\ \left( \frac{3Z_1 Z_2 e^2 a_{TF}^2}{a^3 E} \right)^{1/4}, & E < \frac{2Z_1 Z_2 e^2 d}{a_{TF}^2}. \end{cases} \quad (5)$$

В формулах (5)  $Z_1 e$  и  $Z_2 e$  — заряды атомных ядер частицы и мишени соответственно,  $a_{TF} \approx 0.885 a_B (Z_1^{1/2} + Z_2^{1/2})^{-2/3}$  — радиус экранирования межатомного взаимодействия,  $a_B$  — боровский радиус. Соответствующие выражения для критического расстояния наибольшего сближения с цепочкой и критической поперечной энергии осевого каналирования имеют вид

$$r_L(E) \approx \begin{cases} a_{TF}, & E > \frac{2Z_1 Z_2 e^2 d}{a_{TF}^2}, \\ \left( \frac{9Z_1 Z_2 e^2 a_{TF}^2 d}{4E} \right)^{1/4}, & E < \frac{2Z_1 Z_2 e^2 d}{a_{TF}^2}; \end{cases} \quad (6)$$

$$E_{\perp L}(E) \approx \begin{cases} \frac{2Z_1 Z_2 e^2}{d}, & E > \frac{2Z_1 Z_2 e^2 d}{a_{TF}^2}, \\ \left( \frac{3Z_1 Z_2 e^2 a_{TF}^2 E}{a^3} \right)^{1/2}, & E < \frac{2Z_1 Z_2 e^2 d}{a_{TF}^2}. \end{cases} \quad (7)$$

Аналогичные вычисления, проведенные с использованием стандартного потенциала атомной плоскости [1], приводят к следующим выражениям для критических параметров плоскостного каналирования:

$$\psi_L(E) \approx \begin{cases} \left( \frac{2\pi Z_1 Z_2 e^2 n_{pl} a_{TF}}{E} \right)^{1/2}, & E > \frac{3\pi Z_1 Z_2 e^2}{4a_{TF}}, \\ \left( \frac{6\pi Z_1 Z_2 e^2 n_{pl}^3 a_{TF}^2}{E} \right)^{1/3}, & E < \frac{3\pi Z_1 Z_2 e^2}{4a_{TF}}; \end{cases} \quad (8)$$

$$y_L(E) \approx \begin{cases} a_{TF}, & E > \frac{3\pi Z_1 Z_2 e^2}{4a_{TF}}, \\ \left( \frac{3\pi Z_1 Z_2 e^2 a_{TF}^2}{4E} \right), & E < \frac{3\pi Z_1 Z_2 e^2}{4a_{TF}}; \end{cases} \quad (9)$$

$$E_{\perp L}(E) \approx \begin{cases} 2\pi Z_1 Z_2 e^2 n_{pl} a_{TF}, & E > \frac{3\pi Z_1 Z_2 e^2}{4a_{TF}}, \\ \left( 6\pi Z_1 Z_2 e^2 n_{pl}^3 a_{TF}^2 E^{1/2} \right)^{2/3}, & E < \frac{3\pi Z_1 Z_2 e^2}{4a_{TF}}, \end{cases} \quad (10)$$

где  $n_{pl}$  — поверхностная плотность атомов в атомной плоскости.

Нетрудно, однако, убедиться в том, что формулы (5)–(10) неприменимы для описания каналирования частиц низких энергий, так как при  $E \rightarrow 0$  рассчитанные по этим формулам критические углы  $\psi_L(E) \rightarrow \infty$ .

Наиболее полное исследование поведения критических параметров каналирования в области низких энергий частиц было проведено в работе [12]. В этой работе показано, что в рамках критерия потери корреляций указанный недостаток линдхардовского определения критических параметров легко устраняется введением в рассмотрение вместо потенциала  $U(r)$  изолированной цепочки (плоскости) потенциала  $U_{ch}(r)$  реального канала, который образован несколькими атомными цепочками (или плоскостями) и имеет конечные поперечные размеры:

$$\frac{d^2 U''_{ch}(R - r_L)}{8E} = 1, \quad (11)$$

$$E_{\perp L} = U_{ch}(R - r_L), \quad (12)$$

где  $R$  — расстояние от центра канала до образующих его цепочек (при плоскостном каналировании  $R \equiv p$  — полуширина канала).

Совместно с выражением (4) формулы (11), (12) исчерпывающе определяют критические параметры  $\psi_L(E)$ ,  $n_L(E)$  и  $E_{\perp L}(E)$  при любом потенциале канала  $U_{ch}(r)$ . При этом, как показано в [12], естественным образом возникает еще один критический параметр каналирования — пороговая энергия  $E_L$ , такая, что при энергиях частиц  $E \leq E_L$  каналирование невозможно даже в том случае, если частицы движутся параллельно атомным цепочкам (или плоскостям) в центре канала.

Выражение для пороговой энергии каналирования, полученное из условия потери корреляций (11) имеет вид [12]:

$$E_L = \frac{d^2 U''_{ch}(0)}{8} \quad (13)$$

(в отличие от формул (2), (3) здесь расстояние отсчитывается от центра канала).

В том случае, если канал образован атомными цепочками, используя стандартный потенциал Линдхарда [1], из (13) находим:

$$E_L \approx 3Z_1 Z_2 e^2 a_{TF}^2 d \sum_{i=1}^{N_s} \frac{4 \cos^2 \varphi_i - 1}{4R_i^4}, \quad (14)$$

где  $N_s$  — число цепочек,  $\varphi_i$  — азимутальный угол, характеризующий положение цепочек в поперечной плоскости канала.

Для канала, образованного двумя атомными плоскостями,

$$E_L \approx \frac{3\pi Z_1 Z_2 e^2 a_{TF}^2}{2p^3}. \quad (15)$$

К сожалению, получить с помощью формул (11), (12) явные аналитические выражения для  $\psi_L(E)$ ,  $r_L(E)$  и  $E_{\perp L}(E)$  затруднительно. Однако эти величины могут быть найдены в неявном виде. Так, в приближении стандартного потенциала Линдхарда [1] расстояние наибольшего сближения частицы с атомными цепочками  $r_L(E)$  при осевом каналировании определяется неявным уравнением:

$$E = \frac{3Z_1 Z_2 e^2 d}{4a_{TF}^2} f_1(r_L), \quad (16)$$

где

$$f_1(r_L) = \sum_{i=1}^{N_s} \left[ \frac{2a_{TF}^4 [4R_i(R_i - r_L)(1 - \cos \varphi_i) + 2r_L^2 + 3a_{TF}^2] [R_i(1 - \cos \varphi_i) - r_L]^2}{[2R_i(R_i - r_L)(1 - \cos \varphi_i) + r_L^2 + 3a_{TF}^2]^2 \times [2R_i(R_i - r_L)(1 - \cos \varphi_i) + r_L^2]^2} - \frac{a_{TF}^4}{[2R_i(R_i - r_L)(1 - \cos \varphi_i) + r_L^2 + 3a_{TF}^2] \times [2R_i(R_i - r_L)(1 - \cos \varphi_i) + r_L^2]} \right]. \quad (17)$$

При этом, как следует из (4), (12), критический угол осевого каналирования равен

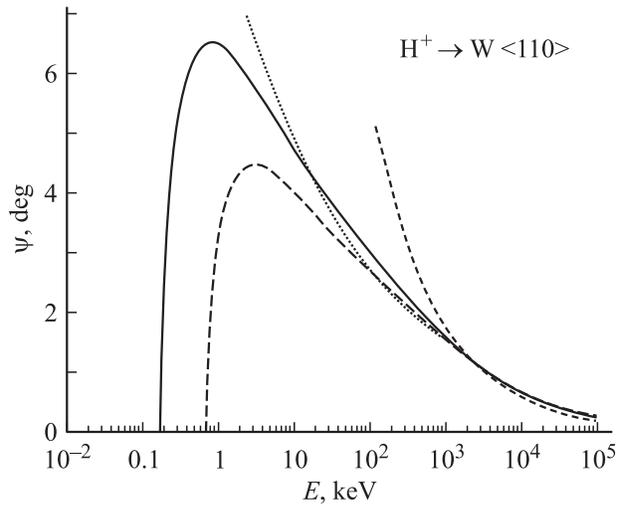
$$\psi_L = \sqrt{\frac{4a_{TF}^2}{3d^2 f_1(r_L)} \sum_{i=1}^{N_s} \left[ \ln \left( 1 + \frac{3a_{TF}^2}{2R_i(R_i - r_L)(1 - \cos \varphi_i) + r_L^2} \right) - \ln \left( 1 + \frac{3a_{TF}^2}{R_i^2} \right) \right]}, \quad (18)$$

а критическая поперечная энергия имеет вид

$$E_{\perp L} = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{d} \sum_{i=1}^{N_s} \left[ \ln \left( 1 + \frac{3a_{TF}^2}{2R_i(R_i - r_L)(1 - \cos \varphi_i) + r_L^2} \right) - \ln \left( 1 + \frac{3a_{TF}^2}{R_i^2} \right) \right]. \quad (19)$$

Формулы Линдхарда (5)–(7) вытекают из (16)–(19), если пренебречь влиянием на движение каналированной частицы всех цепочек, кроме ближайшей, и воспользоваться тем, что  $a_{TF} \ll R_i$ .

На рис. 1 представлен график функции  $\psi_L(E)$ , построенный по формулам (16)–(18) для протонов, которые движутся между цепочками  $\langle 110 \rangle$  монокристалла вольфрама (сплошная кривая). Графики зависимости от энергии критического угла каналирования Линдхарда (5) приведены на этом же рисунке пунктиром.



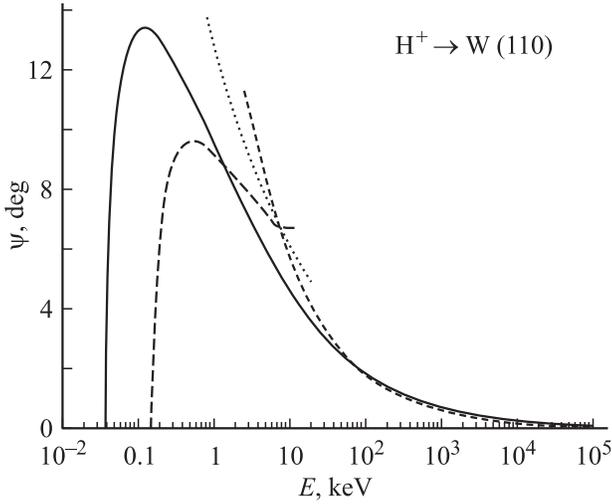
**Рис. 1.** Критические углы осевого каналирования, рассчитанные для протонов различных энергий, движущихся вдоль цепочек  $\langle 110 \rangle$  монокристалла вольфрама: по критерию потери корреляций  $\psi_L(E)$  (сплошная кривая), критерию потери устойчивости движения,  $\psi_S(E)$  (штриховая кривая) и по приближенным формулам Линдхарда (5) (пунктир).

Как видно из рисунка, учет конечности поперечных размеров канала приводит к появлению максимума в зависимости  $\psi_L(E)$  и обращению критического угла каналирования в нуль при энергиях  $E \leq E_L$  [12]. Такое поведение  $\psi_L(E)$  в области низких энергий частиц принципиально отличается от предсказанного Линдхардом. Что же касается области высоких энергий, то в ней критические углы осевого каналирования, рассчитанные по формулам (16)–(18) и (5), практически не различаются (небольшое отличие в области сверхвысоких энергий вызвано тем, что в формуле (5) Линдхардом опущен множитель, пропорциональный квадратному корню из логарифма энергии; при его учете различие исчезает).

Максимум  $\psi_L(E)$  приходится на энергию  $E = 4E_L$ . Если цепочки находятся на одинаковом расстоянии  $R$  от центра канала, соответствующее этой энергии расстояние  $r_L \approx 0.6R$ , а критический угол  $\psi_L \approx 0.5R/d$ .

Описанное поведение критического угла осевого каналирования в области низких энергий частиц было обнаружено в работе [13] при машинном моделировании каналирования ионов между двумя атомными цепочками. В этой же работе впервые было высказано соображение, что причиной такого поведения критического угла каналирования является конечная ширина осевого канала. Аналогичный эффект имеет место и в случае плоскостного каналирования частиц в кристаллах.

При плоскостном каналировании в приближении стандартного межатомного потенциала Линдхарда [1] расстояние наибольшего сближения каналированной частицы с атомными плоскостями  $y_L(E)$  определяется неявным



**Рис. 2.** Критические углы плоскостного каналирования, рассчитанные для протонов различных энергий, движущихся вдоль плоскостей (110) монокристалла вольфрама: по критерию потери корреляции,  $\psi_L(E)$  (сплошная кривая), по критерию потери устойчивости движения,  $\psi_s(E)$  (штриховая кривая) и по приближенным формулам (8) (пунктир).

уравнением:

$$E = \frac{3\pi Z_1 Z_2 e^2 a_{TF}^2}{4} \times \left[ \frac{1}{\sqrt{[(2p - y_L)^2 + 3a_{TF}^2]^3}} + \frac{1}{\sqrt{[y_L^2 + 3a_{TF}^2]^3}} \right]. \quad (20)$$

Критический угол плоскостного каналирования равен

$$\psi_L = \left\{ \frac{8n_{pl} \sqrt{[(2p - y_L)^2 + 3a_{TF}^2] (y_L^2 + 3a_{TF}^2)^3}}{3a_{TF}^2} \times \frac{\sqrt{y_L^2 + 3a_{TF}^2} + \sqrt{(2p - y_L)^2 + 3a_{TF}^2} - 2\sqrt{p^2 + 3a_{TF}^2}}{\sqrt{[y_L^2 + 3a_{TF}^2]^3} + \sqrt{[(2p - y_L)^2 + 3a_{TF}^2]^3}} \right\}^{1/2}, \quad (21)$$

а критическая поперечная энергия (12) определяется выражением

$$E_{\perp L} = 2\pi Z_1 Z_2 e^2 n_{pl} \left| \sqrt{y_L^2 + 3a_{TF}^2} + \sqrt{(2p - y_L)^2 + 3a_{TF}^2} - 2\sqrt{p^2 + 3a_{TF}^2} \right|. \quad (22)$$

В области высоких энергий частиц (при  $y_L \ll p$ ), с учетом того, что  $p \gg a_{TF}$ , записанные выражения снова переходят в формулы (8)–(10), полученные в приближении изолированной атомной плоскости.

График функции  $\psi_L(E)$ , построенный по формулам (20), (22) для протонов, которые движутся между

плоскостями (110) монокристалла вольфрама, представлен на рис. 2 (сплошная кривая). На этом же рисунке пунктиром изображены графики зависимости от энергии критического угла плоскостного каналирования, рассчитанные по приближенным формулам (8).

Из рис. 2 видно, что, как и в осевом случае (рис. 1), при плоскостном каналировании функция  $\psi_L(E)$  имеет максимум и обращается в нуль при энергии  $E \leq E_L$ , что является следствием конечности ширины канала, образованного атомными плоскостями. Как и в осевом случае, максимум  $\psi_L(E)$  приходится на случай  $E = 4E_L$ . При этом  $y_L \approx 0.5p$ , а  $\psi_L \approx p\sqrt{n_{pl}/3}$ .

## 2. Критические параметры каналирования, рассчитанные исходя из критерия потери устойчивости движения

При исследовании вопроса о пороговой энергии каналирования в работе [14] было показано, что в реальных каналах может иметь место эффект параметрической неустойчивости движения частиц. При этом пороговая энергия каналирования  $E_S$ , обусловленная этим эффектом, была определена как энергия, при которой параметрическая неустойчивость возникает даже при движении строго по оси симметрии канала.

В работе [12] показано, что кроме ограничения на полную энергию  $E$  при  $E > E_S$  параметрическая неустойчивость накладывает ограничения и на возможные поперечные энергии каналированных частиц. Таким образом, наряду с критерием потери корреляций существует еще один критерий, обуславливающий существование критических параметров каналирования. Далее, следуя работе [12], будем называть его критерием устойчивости, а для соответствующих ему критических параметров каналирования введем обозначения  $\psi_S(E)$ ,  $r_S(E)$  [или  $y_S(E)$ ] и  $E_{\perp S}(E)$ .

Параметрическая неустойчивость развивается в том случае, если угол рассеяния частицы на атомах кристалла начинает превышать критический угол каналирования. Таким образом, критерий устойчивости приводит к следующему соотношению между критическим расстоянием наибольшего сближения частицы с атомной цепочкой  $r_S(E)$  и критическим углом  $\psi_S(E)$  [12]:

$$\psi_S = \frac{dU'_{ch}(R - r_S)}{2E}. \quad (23)$$

Это уравнение совместно с выражениями

$$E_{\perp S} = U_{ch}(R - r_S), \quad (24)$$

$$E\psi_S^2 = E_{\perp S}, \quad (25)$$

аналогичными (8) и (9), определяет критический угол потери устойчивости движения  $\psi_S(E)$ , расстояние наибольшего сближения  $r_S(E)$  и критическую поперечную

энергию потери устойчивости  $E_{\perp S}(E)$  при любом потенциале канала  $U_{\text{ch}}(r)$ . Из этих же формул и условия  $\psi_S(E_S) = 0$  вытекает следующее выражение для критической энергии каналирования  $E_S$  по критерию устойчивости [12];

$$E_S = \lim_{\psi_S \rightarrow 0} \left[ \frac{dU'_{\text{ch}}(0)}{2\psi_S} \right] = \frac{d^2U''(0)}{2} = 4E_L. \quad (26)$$

С учетом (14) и (15) для случая каналирования частиц в монокристаллах из (26) получаем:

$$F_S \approx 2Z_1Z_2e^2a_{TF}^2d \sum_{i=1}^{N_s} \frac{4 \cos^2 \varphi_i - 1}{R_i^4}; \quad (27)$$

при плоскостном каналировании

$$E_S \approx \frac{6\pi Z_1Z_2e^2a_{TF}^2}{p^3}. \quad (28)$$

Расчитанное по критерию устойчивости расстояние наибольшего сближения  $r_S(E)$  в приближении стандартного потенциала Линдхарда [1] при осевом каналировании задается неявным уравнением

$$E = \frac{9Z_1Z_2e^2d}{a_{TF}^2} f_2(r_S), \quad (29)$$

где

$$f_2(r_S) = \frac{\left[ \sum_{i=1}^{N_s} \frac{a_{TF}^3 [R_i(1 - \cos \varphi_i) - r_S]}{[2R_i(R_i - r_S)(1 - \cos \varphi_i) + r_S^2 + 3a_{TF}^2] [2R_i(R_i - r_S)(1 - \cos \varphi_i) + r_S^2]} \right]^2}{\sum_{i=1}^{N_s} \left[ \ln \left( 1 + \frac{3a_{TF}^2}{2R_i(R_i - r_S)(1 - \cos \varphi_i) + r_S^2} \right) - \ln \left( 1 + \frac{3a_{TF}^2}{R_i^2} \right) \right]}. \quad (30)$$

При этом обусловленный параметрической неустойчивостью критический угол осевого каналирования равен

$$\psi_S = \frac{a_{TF}}{3df_2(r_S)} \times \sum_{i=1}^{N_s} \frac{a_{TF}^3 [R_i(1 - \cos \varphi_i) - r_S]}{[2R_i(R_i - r_S)(1 - \cos \varphi_i) + r_S^2 + 3a_{TF}^2] \times [2R_i(R_i - r_S)(1 - \cos \varphi_i) + r_S^2]}, \quad (31)$$

а критическая поперечная энергия (24) определяется выражением

$$E_{\perp S} = \frac{Z_1Z_2e^2}{d} \sum_{i=1}^{N_s} \left[ \ln \left( 1 + \frac{3a_{TF}^2}{2R_i(R_i - r_S)(1 - \cos \varphi_i) + r_S^2} \right) - \ln \left( 1 + \frac{3a_{TF}^2}{R_i^2} \right) \right]. \quad (32)$$

При плоскостном каналировании в приближении стандартного межатомного потенциала Линдхарда [1] анало-

гичные формулы имеют следующий вид:

$$E = \frac{\pi Z_1Z_2e^2}{2 \left( \sqrt{y_S^2 + 3a_{TF}^2} + \sqrt{(2p - y_S)^2 + 3a_{TF}^2} - 2\sqrt{p^2 + 3a_{TF}^2} \right)} \times \left[ \frac{2p - y_S}{\sqrt{(2p - y_S)^2 + 3a_{TF}^2}} - \frac{y_S}{\sqrt{y_S^2 + 3a_{TF}^2}} \right]^2, \quad (33)$$

$$\psi_S = 2n_{pk}^{1/2} \left( \sqrt{y_S^2 + 3a_{TF}^2} + \sqrt{(2p - y_S)^2 + 3a_{TF}^2} - 2\sqrt{p^2 + 3a_{TF}^2} \right) \times \left[ \frac{2p - y_S}{\sqrt{(2p - y_S)^2 + 3a_{TF}^2}} - \frac{y_S}{\sqrt{y_S^2 + 3a_{TF}^2}} \right]^{-1}, \quad (34)$$

$$E_{\perp S} = 2\pi Z_1Z_2e^2n_{pl} \left| \sqrt{y_S^2 + 3a_{TF}^2} + \sqrt{(2p - y_S)^2 + 3a_{TF}^2} - 2\sqrt{p^2 + 3a_{TF}^2} \right|. \quad (35)$$

Графики функции  $\psi_S(E)$  при каналировании протонов в каналах, образованных цепочками  $\langle 110 \rangle$  и плоскостями  $(110)$  монокристалла вольфрама, представлены на рис. 1 и 2 штриховыми кривыми. Как показывают эти графики, функции  $\psi_S(E)$ , как и  $\psi_L(E)$ , имеют максимум и обращаются в нуль при  $E \leq E_S$  [12].

Максимум  $\psi_S(E)$  приходится на энергию  $E = 4E_S$ . При этом в осевом случае (если цепочки находятся на одинаковом расстоянии  $R$  от центра канала)  $r_S \approx 0.5R$ ,  $\psi_S \approx R/(3d)$ , а при плоскостном каналировании  $y_S \approx 0.4p$ ,  $\psi_S \approx 0.4p\sqrt{n_{pl}}$ .

В случае аппроксимации потенциала канала параболой из формул (23)–(25) можно получить следующее простое аналитическое выражение [12], хорошо описывающее поведение  $\psi_S(E)$  в области максимума:

$$\psi_S(E) \approx A \left( \frac{E_S}{E} \right)^{1/4} \sqrt{1 - \sqrt{\frac{E_S}{E}}}. \quad (36)$$

Константа  $A$  в этом выражении зависит от типа каналирования и выбора потенциала канала. Для потенциала Линдхарда  $A \approx 2R/(3d)$  в осевом и  $A \approx 0.8p\sqrt{n_{pl}}$  — в плоскостном случае.

Приближенная формула (36), так же как и точно расчитанные кривые  $\psi_S(E)$ , имеет максимум при  $E = 4E_S$ . Аналогичное выражение можно использовать и для описания в области максимума зависимости  $\psi_L(E)$ :

$$\psi_L(E) \approx B \left( \frac{E_L}{E} \right)^{1/4} \sqrt{1 - \sqrt{\frac{E_L}{E}}}. \quad (37)$$

Для потенциала Линдхарда постоянная  $B \approx R/d$  в случае осевого и  $B \approx 2p\sqrt{n_{pl}/3}$  — в случае плоскостного каналирования.

### 3. Влияние на критические параметры каналирования тепловых колебаний атомов решетки

Следует отметить, что представленные в двух предыдущих разделах формулы, включая формулы Линдхарда (5)–(10), не учитывают влияния на критические параметры каналирования тепловых колебаний атомов решетки, вследствие чего вопрос о температурной зависимости этих параметров требует отдельного рассмотрения.

Самый общий подход к описанию этой зависимости заключается в том, чтобы заменить в формулах (11), (12) и (24), (25) статический потенциал реального канала  $U_{ch}(r)$  потенциалом  $U_{ch}^T(r)$ , который представляет собой сумму непрерывных потенциалов образующих канал атомных цепочек или плоскостей, усредненных по тепловым колебаниям решетки. При этом, однако, заранее очевидно, что результаты такой замены будут существенно отличаться от уже полученных для тех частиц, которые могут приближаться к атомным цепочкам или плоскостям на расстоянии, сравнимые с длиной экранирования  $a_{TF}$ .

Действительно, тепловые смещения атомов приводят к изменению эффективных значений непрерывных потенциалов только в малой области вблизи цепочек или плоскостей, размеры которой близки к  $a_{TF}$  [2–5]. Оставаясь в режиме каналирования, этой области могут достичь только частицы высоких энергий, основным механизмом деканалирования которых является потеря корреляций при столкновениях с атомами кристалла. Таким образом, учет тепловых колебаний решетки будет приводить к изменению значений критических параметров каналирования только в той области энергий, где выполняются асимптотические формулы Линдхарда (5)–(10), т.е. для частиц с энергией  $E \geq 2Z_1Z_2e^2d/a_{TF}^2$  в случае осевого и  $E \geq 3\pi Z_1Z_2e^2/(4a_{TF})$  — в случае плоскостного каналирования.

Влияние температуры кристалла на критические параметры каналирования в этой области можно учесть, полагая [2–5], что расстояние наибольшего сближения с атомными цепочками равно

$$r_L \approx \sqrt{a_{TF}^2 + \sigma_{\perp}^2}, \quad (38)$$

а с атомными плоскостями

$$y_L \approx a_{TF} + \sigma_y, \quad (39)$$

где  $\sigma_{\perp}$  и  $\sigma_y$  — это соответственно двумерная и одномерная среднеквадратичные амплитуды тепловых колебаний атомов решетки.

Взяв в формулах (3) и (4), определяющих  $E_{\perp L}$  и  $\psi_L$ , вместо потенциала статической атомной цепочки усредненной по тепловым колебаниям потенциал  $U^T(r)$ , получим

— при осевом каналировании (в области  $E \geq 2Z_1Z_2e^2d/a_{TF}^2$ );

$$E_{\perp L} \approx U^T \left( \sqrt{a_{TF}^2 + \sigma_{\perp}^2} \right), \quad (40)$$

$$\psi_L \approx \sqrt{\frac{U^T \left( \sqrt{a_{TF}^2 + \sigma_{\perp}^2} \right)}{E}}; \quad (41)$$

— при плоскостном каналировании (в области  $E \geq 3\pi Z_1Z_2e^2/(4a_{TF})$ ):

$$E_{\perp L} \approx U^T(a_{TF} + \sigma_y), \quad (42)$$

$$\psi_L \approx \sqrt{\frac{U^T(a_{TF} + \sigma_y)}{E}}. \quad (43)$$

В частности, для межатомных потенциалов с экспоненциальной экранировкой, например для потенциала Мольер [2–5], из (40)–(43) находим

— в случае осевого каналирования (при  $E \geq 2Z_1Z_2e^2d/a_{TF}^2$ ):

$$E_{\perp L} \approx \frac{Z_1Z_2e^2}{d} \sum_{i=1}^3 \alpha_i \exp \left( \frac{\beta_i^2 \sigma_{\perp}^2}{4a_{TF}^2} \right) \times \int_0^1 \exp \left( -\frac{(a_{TF}^2 + \sigma_{\perp}^2)x}{\sigma_{\perp}^2} - \frac{\beta_i^2 \sigma_{\perp}^2}{4a_{TF}^2 x} \right) \frac{dx}{x}, \quad (44)$$

$$\psi_L \approx \left[ \frac{Z_1Z_2e^2}{dE} \sum_{i=1}^3 \alpha_i \exp \left( \frac{\beta_i^2 \sigma_{\perp}^2}{4a_{TF}^2} \right) \times \int_0^1 \exp \left( -\frac{(a_{TF}^2 + \sigma_{\perp}^2)x}{\sigma_{\perp}^2} - \frac{\beta_i^2 \sigma_{\perp}^2}{4a_{TF}^2 x} \right) \frac{dx}{x} \right]^{1/2}; \quad (45)$$

— в случае плоскостного каналирования (при  $E \geq 3\pi Z_1Z_2e^2/(4a_{TF})$ ):

$$E_{\perp L} \approx \pi Z_1Z_2e^2 a_{TF} n_{pl} \sum_{i=1}^3 \left\{ \frac{\alpha_i}{\beta_i} \exp \left( \frac{\beta_i^2 \sigma_y^2}{2a_{TF}^2} \right) \times \left[ \exp \left( -\frac{\beta_i(a_{TF} + \sigma_y)}{a_{TF}} \right) \operatorname{erfc} \left( \frac{\beta_i \sigma_y}{\sqrt{2}a_{TF}} - \frac{a_{TF} + \sigma_y}{\sqrt{2}\sigma_y} \right) + \exp \left( \frac{\beta_i(a_{TF} + \sigma_y)}{a_{TF}} \right) \operatorname{erfc} \left( \frac{\beta_i \sigma_y}{\sqrt{2}a_{TF}} + \frac{a_{TF} + \sigma_y}{\sqrt{2}\sigma_y} \right) \right] \right\}, \quad (46)$$

$$\psi_L \approx \left( \frac{\pi Z_1 Z_2 e^2 a_{TF} n_{pl}}{E} \sum_{i=1}^3 \left\{ \frac{\alpha_i}{\beta_i} \exp\left(\frac{\beta_i^2 \sigma_y^2}{2a_{TF}^2}\right) \times \left[ \exp\left(-\frac{\beta_i(a_{TF} + \sigma_y)}{a_{TF}}\right) \operatorname{erfc}\left(\frac{\beta_i \sigma_y}{\sqrt{2}a_{TF}} - \frac{a_{TF} + \sigma_y}{\sqrt{2}\sigma_y}\right) + \exp\left(\frac{\beta_i(a_{TF} + \sigma_y)}{a_{TF}}\right) \operatorname{erfc}\left(\frac{\beta_i \sigma_y}{\sqrt{2}a_{TF}} + \frac{a_{TF} + \sigma_y}{\sqrt{2}\sigma_y}\right) \right] \right\} \right)^{1/2}, \quad (47)$$

где  $\alpha_i = (0.35; 0.55; 0.1)$ ,  $\beta_i = (0.3; 1.2; 6)$ ,  $\operatorname{erfc}(x)$  — дополнительный интеграл вероятности.

Нетрудно понять, что связанное с тепловыми колебаниями увеличение (38), (39) области вблизи цепочек и плоскостей, где каналирование частиц невозможно, с ростом температуры приводит к уменьшению критической поперечной энергии и, как следствие, к уменьшению критических углов осевого и плоскостного каналирования.

## Заключение

Полученные в настоящей работе результаты показывают (рис. 1), что вплоть до весьма высоких значений энергии ионов при осевом каналировании имеет место неравенство  $\psi_L(E) > \psi_S(E)$ . Это значит, что практически всегда определяющим механизмом выведения этих частиц из режима осевого каналирования является параметрическая неустойчивость [12]: по достижении значения  $\psi_S(E)$  скорость увеличения угла  $\psi$  благодаря параметрической неустойчивости движения резко возрастает, и его значение быстро приближается к значению  $\psi_L(E)$ , при котором ионы деканалируют в результате рассеяния на большой угол в парных столкновениях с атомами кристалла.

С ростом энергии частиц оба механизма — потеря устойчивости и потеря корреляций — дают практически одинаковые значения критических углов осевого каналирования:  $\psi_L(E) \approx \psi_S(E)$ . При этом расстояние наибольшего сближения частиц с атомными цепочками оказывается много меньшим ширины осевого канала ( $r_L \approx r_S \ll R$ ), и влиянием всех цепочек, кроме ближайшей, можно пренебречь. Именно вследствие этого при высоких значениях энергии частиц значения  $\psi_L(E)$  и  $\psi_S(E)$  в случае осевого каналирования практически совпадают со значениями критического угла Линдхарда (5).

При плоскостном каналировании (рис. 2) параметрическая неустойчивость является основным механизмом деканалирования только в области сравнительно низких энергий ионов. С ростом энергии неравенство  $\psi_L(E) > \psi_S(E)$  быстро изменяется на противоположное и доминирующим механизмом выведения частиц из режима каналирования становится потеря корреляций. При этом, как и в случае осевого каналирования, расстояние наибольшего сближения ионов с атомами кристалла оказывается много меньшим ширины плоскостного

канала. Поэтому при описании деканалирования таких частиц можно ограничиться влиянием только одной, ближайшей, атомной плоскости, а для расчета критических углов плоскостного каналирования — использовать приближенные формулы (8).

Анализ зависимости критических параметров каналирования от температуры кристаллов показывает, что для ионов низких энергий этой зависимостью можно пренебречь. Связанное с тепловыми колебаниями атомов увеличение области вблизи цепочек или плоскостей, где каналирование ионов невозможно, существенно только для частиц высоких энергий и с ростом температуры приводит к уменьшению критической поперечной энергии и критических углов каналирования.

В заключение отметим, что полученные в настоящей работе результаты допускают естественное обобщение и на случай каналирования ионов в углеродных нанотрубках [15].

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 07-07-12015).

## Список литературы

- [1] Линдхард Й. УФН. 1969. Т. 99. Вып. 2. С. 249–296.
- [2] Gemmell D.S. // Rev. Mod. Phys. 1974. Vol. 46. N 1. P. 129–217.
- [3] Кумахов М.А., Ширмер Г. Атомные столкновения в кристаллах. М.: Атомиздат, 1980.
- [4] Оцуки Е.-Х. Взаимодействие заряженных частиц с твердыми телами. М.: Мир, 1985.
- [5] Рябов В.А. Эффект каналирования. М.: Энергоатомиздат, 1994.
- [6] Feldman L.C., Mayer J.W., Picraux S.T. Materials Analysis by Ion Channeling. N.Y.: Academic Press, 1982.
- [7] Biryukov V.M., Chesnokov Y.A., Kotov V.I. Crystal Channeling and Its Application at High-Energy Accelerators. Berlin: Springer, 1997.
- [8] Мейер Дж., Эрикссон Л., Дэвис Дж. Ионное легирование. М.: Мир, 1973.
- [9] Ion Implantation in Semiconductors and Other Materials / Ed. by V.L. Crowder. N.Y.: Plenum, 1974.
- [10] Броудай И., Мерей Дж. Физические основы микротехнологии. М.: Мир, 1985.
- [11] Miskovic Z.I. // Rad. Eff. Def. Solids. 2007. Vol. 162. N 3–4. P. 185–205.
- [12] Рожков В.В., Дюльдя С.В. // Письма в ЖТФ. 1984. Т. 10. Вып. 19. С. 1181–1185.
- [13] Kornelsen E.V., Van Gorkum A.A. // Nucl. Instr. Meth. 1980. Vol. 170. N 1–3. P. 161.
- [14] Кумахов М.А., Муралев В.А. // Изв. АН СССР. Сер. физ. 1973. Т. 37. С. 2585.
- [15] Матюхин С.И., Фроленко К.Ю. // Письма в ЖТФ. 2007. Т. 33. Вып. 2. С. 23–30.