УДК 539.736.14…669.849

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ КАНАЛИРОВАНИЯ ПРОТОНОВ В КРИСТАЛЛАХ

Н.А. Скакун, В.М. Шершнев, Н.А. Шляхов
Национальный научный центр «Харьковский физико-технический институт», ул. Академическая,1, Харьков, 61108
Поступила в редакцию 10 июня 2004 г.

Разработана программа компьютерного моделирования траекторий протонов, каналированных вдоль атомных плоскостей в кристалле. Изучено перераспределение плотности потока протонов в плоскостном канале монокристаллического раствора Ni – 0,18ат.%C. Для изучения ориентационных эффектов предложен подход, основанный на использовании выходов γ-квантов при возбуждении изолированных резонансов в реакциях на ядрах, которые занимают определенные позиции в кристалле. Показана существенная зависимость выхода γ-квантов резонансной ядерной реакции $^{13}C(p, \gamma)^{14}N$ от энергии каналированных протонов.
КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА: каналирование, ядерная реакция, ядерный резонанс, местоположение примеси.

Основные экспериментальные и теоретические данные об ориентационных эффектах при каналировании положительно заряженных частиц с энергией порядка 1 МэВ получены (в том числе с помощью компьютерного моделирования) из зависимостей выхода упругого рассеяния ионов гелия и протонов от угла рассеяния, заряда атома мишени и каналированной частицы, типа решетки, кристаллографического направления и т.д. [1,2]. Достоверность и надежность результатов таких исследований в первую очередь определяется разрешением этого метода по энергии. Разрешение по энергии зависит от моноэнергетичности пуча частиц, падающих на кристалл, страгглинга энергии частиц в процессе их проникновения в глубь кристалла и разрешающей способности спектрометра, который регистрирует рассеянные частицы. В приповерхностной области кристалла наибольший вклад в неопределенность результатов измерений этим методом вносит последний из перечисленных факторов [3].

Для изучения ориентационных эффектов, при каналировании протонов вдоль плотноупакованных атомами плоскостей, в настоящей работе предлагается подход и метод, в котором используется выход излучений “узких”, изолированных резонансов, возбуждаемых на ядрах примесных атомов, занимающих в кристалле определенные, известные позиции. В этом методе исключается влияние на результаты измерений разрешающей способности спектрометров излучений, что, наряду с повышением достоверности и надежности измерений, позволяет получить новые сведения, в частности, об особенностях формирования потока каналированных протонов в примыкающей к поверхности области кристалла. Для изучения возможностей этого подхода к исследованию ориентационных эффектов была разработана и использовалась программа компьютерного моделирования траекторий каналированных частиц в кристалле.

ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Свойством многих ядерных реакций является наличие одного или нескольких изолированных пиков или «резонансов» в зависимости выхода излучений (например, в (p, γ) реакциях) от энергии бомбардирующих частиц. Когда энергия протонов (E_0) больше чем энергия, при которой реализуется резонанс ($E_{рез}$), протоны в аморфной мишени теряют энергию, пока она не достигнет значения $E_{рез}$ на глубине *“x”*, где и происходит ядерная реакция. Очевидно, выход реакции пропорционален концентрации атомов, на которых возбуждается реакция, в элементе *“δx”*. Энергия налетающего пучка E_0 и глубина проникновения частиц в мишень *“x”*, связаны уравнением:

$$E_0 = E_{рез} + \left(\frac{dE}{dx}\right) x, \qquad (1)$$

где *(dE/dx)* – энергетические потери протонов в мишени.

В случае возбуждения реакции каналированными частицами, рис.1, выход резонансного излучения зависит не только от концентрации примесных атомов, но и от кристаллографического направления, местоположения атомов примеси в канале, угла, под которым частицы попадают в канал, тормозных потерь энергии каналированных частиц, страгглинга энергии и других факторов. На рис.1а схематически показаны траектории частиц, когда пучок поступает в канал вдоль атомной плоскости. В пределах канала, под действием сил отталкивания от атомных плоскостей, частицы совершают колебания, происходит перераспределение потока. В результате этого в середине канала образуются сгущения и разрежения траекторий. Предположим, что атомы, на которых возбуждается реакция, располагаются в середине канала. Тогда вероятность соударения каналированных частиц с атомами в зоне канала, где реализуется резонанс, будет зависеть от распределения

потока. Выход резонансного излучения максимален, когда поступающие в канал частицы с энергией $E_0 > E_{рез}$ испытают замедление и достигнут значения $E_{рез}$ на глубине *"x"*, где располагаются узлы траекторий.Так, по мере увеличения энергии частиц и продвижения резонанса вглубь канала, в зависимости выхода реакции от энергии образуется серия пиков, рис.1б.

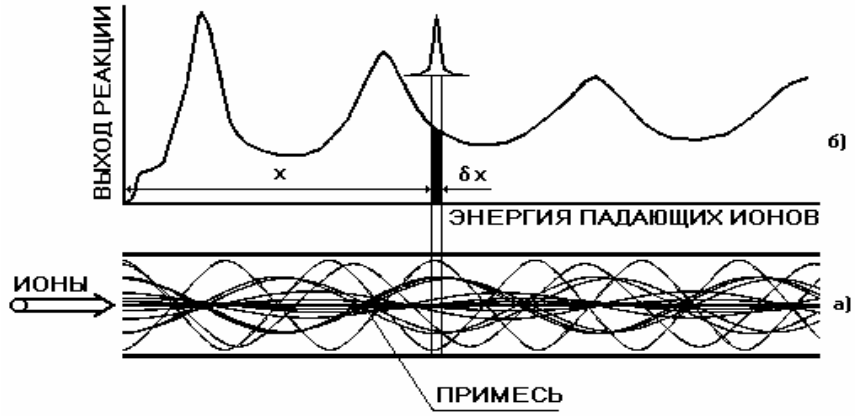

Рис.1. Принцип измерения выхода резонансной ядерной реакции от энергии налетающего пучка ионов
а) осцилляции траекторий частиц в плоскостном канале, $\varphi_{вх} = 0{,}0°$;
б) выход γ - квантов резонансной ядерной реакции на ядрах примеси расположенных, в центре канала.

Исследуя различные особенности выхода γ-квантов реакции возбуждаемой, каналированными протонами, можно экспериментально измерить значения величин (тормозные потери, тепловые колебания атомов кристалла и примеси и др.), влияющих на формирование траекторий. При анализе экспериментальных данных оказалось весьма эффективным использование компьютерного моделирования.

ФИЗИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ РАСЧЕТА ТРАЕКТОРИЙ КАНАЛИРОВАННЫХ ИОНОВ

Разработана и использовалась программа моделирования прохождения легких положительных частиц вдоль плоскостного канала. В основе программы лежит модель усредненного плоскостного потенциала с учетом тепловых колебаний атомов решетки [4]. Использовали термически модифицированное приближение усредненного потенциала плоскости в форме, предложенной Мольером.

Неоднородность энергетических потерь в поперечной плоскости канала моделировали с помощью функции:

$$\Delta E = \begin{cases} \Delta E_{амр} - 2h\dfrac{x}{D}, & 0 < x < D/2, \\ \Delta E_{амр} - h, & x = D/2, \\ \Delta E_{амр} - 2h\left(1 - \dfrac{x}{D}\right), & D/2 < x < D, \end{cases} \qquad (2)$$

где x – координата частицы в поперечной плоскости канала; ΔE – потери энергии; $\Delta E_{амр}$ – потери энергии для аморфной мишени; D – межплоскостное расстояние; h – минимальные потери энергии в центре плоскостного канала.

Многократное рассеяние на электронах существенно влияет на формирование траектории частицы в центре канала, так как в этой области суммарная величина сил близка к нулю. Поэтому этот процесс учитывали с помощью выражения [5]:

$$\frac{\partial < \psi^2 >}{\partial z} \sim \frac{1}{E}\frac{m_e}{M}\left(-\frac{\partial E}{\partial z}\right), \qquad (3)$$

где m_e – масса электрона, M – масса атома, E – полная энергия иона, $(\partial E/\partial z)$ – энергетические потери.

Относительные потери энергии, связанные с бинарным соударением частиц и атомов решетки, вычисляли в приближении:

$$\frac{\Delta E}{E} \approx \frac{m}{M}\Theta^2, \qquad (4)$$

где Θ - угол рассеяния, m, M – массы электрона и атома мишени, на которой происходит рассеяние.

Примесные атомы, расположенные в центре плоскостного канала, совершают тепловые колебания в поперечном сечении канала по распределению Гаусса относительно равновесного положения. Вероятность близких соударений с примесными атомами вычисляли по формуле:

$$P(r) = \frac{1}{\sqrt{2\pi < u^2 >}} \exp\left(\frac{-r^2}{2 < u^2 >} \right), \qquad (5)$$

где r – расстояние от частицы до равновесного положения атома, $<u^2>$ – среднеквадратичная амплитуда тепловых колебаний.

В программе для вычисления вероятностных величин по их распределениям, используется метод Монте-Карло. Начальная энергия ионов, падающих на кристалл, моделировалась с помощью распределения Гаусса и разыгрывалась для каждой новой частицы. Среднее значение распределения соответствовало энергии ускорителя, а среднеквадратичное отклонение – энергетическому разбросу. В соответствии с равномерным распределением также разыгрывался разброс по углу в заданном интервале и начальное положение частицы в поперечном сечении канала.

Частица двигалась в суммарном поле сил четырех ближайших атомных плоскостей. Ее траектория состояла из отдельных отрезков прямых линий длиною Δr. В конце каждого отрезка решались дифференциальные уравнения движения, вычислялись новые координаты частицы, вектор импульса, потери энергии и разыгрывался разброс частиц по углу за счет многократного рассеяния на электронах. Для каждого положения частицы разыгрывалось наличие примесного атома, вычислялась вероятность соударения каналируемой частицы с этим атомом, и формировалась зависимость вероятности соударения от энергии частиц.

Для вычисления выхода резонанса ядерной реакции использовалось распределение в форме Брейта – Вигнера. Результаты расчета выхода излучений реакции нормировались на случай полной разориентации направления пучка относительно выбранного направления в кристалле.

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТРАЕКТОРИЙ. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Разработанная программа использовалась для моделирования и расчета эволюции траекторий протонов в плоскостном канале монокристалла никеля, содержащего 0,18 ат.% углерода, обогащенного (≈80%) изотопа ^{13}C. В программе заложены такие исходные данные:

1. Ядерная реакция - $^{13}C(p, \gamma)^{14}N$. При энергии протонов 1,7476 МэВ в этой реакции возбуждается сильный изолированный резонанс. Естественная ширина резонанса составляет 70 эВ. Сечение реакции в максимуме ≈ 300 мбарн/стер.

2. Мишень. В качестве мишени использовался монокристалл никеля и твердый монокристаллический раствор Ni – 0,18ат.%C. В статье “Локализация атомов углерода в кристаллической решетке никеля”, опубликованной в этом номере журнала, показано, что при концентрациях в никеле, не превышающих предел растворимости, атомы углерода при комнатных условиях располагаются в октаэдрических междоузлиях. В кристаллах с ГЦК – решеткой, к которым относится никель, окта-междоузлий столько же, сколько и атомов матрицы. В направлении <111> плоскости из атомов никеля чередуются с плоскостями из окта-междоузлий. Плоскости междоузлий, в которых находятся атомы углерода располагаются в центре между плоскостями (111) атомов никеля.

3. Пучок протонов. Использовались протоны с энергией в интервале от 1,745 до 1,758 МэВ. Угол между направлением импульса пучка и плоскостью (111), $\varphi_{вх} = 0{,}0°$. Угловая расходимость пучка составляла $\Delta\varphi_{вх} = 0{,}05°$. Разброс протонов по энергии на входе в канал составлял ≈ 80 эВ.

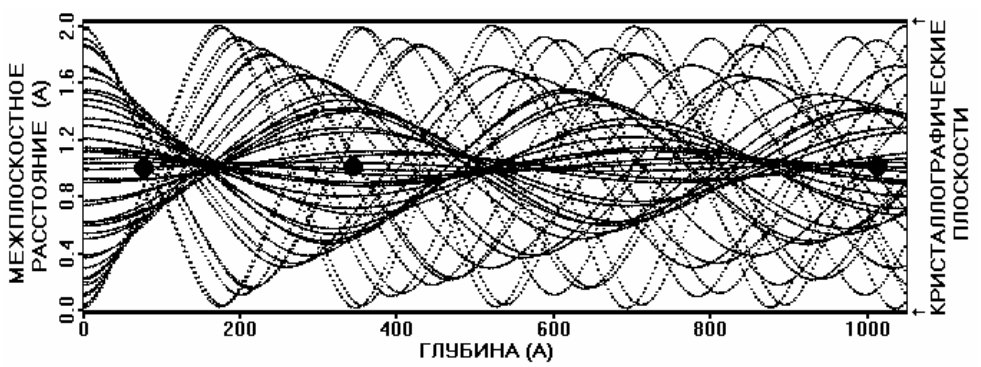

Рис.2. Осцилляции траекторий протонов с энергией 429 кэВ в плоскостном канале (111) кристалла Ni – 0,18ат.%C; $\varphi_{вх} = 0{,}0°$. В середине канала в плоскости из междоузлий показаны атомы изотопа C^{13} (•).

На рис.2 показаны траектории нескольких десятков протонов в плоскостном канале (111) монокристаллического раствора Ni – 0,18ат.%C. Крутизна траекторий зависит от удаленности протона от атомной плоскости в точках, где потенциальная энергия максимальна. Основная доля протонов, поступивших в канал, не может приблизиться к ядрам никеля и рассеяться на них под большим углом. Соударения каналированных протонов с атомами, которые располагаются в окта-междоузлиях, ничем не ограничены, более того, вероятность соударения каналированных протонов с этими атомами существенно возрастает за счет перераспределения плотности потока протонов в канале [6]. Длина волны у траекторий протонов зависит от амплитуды колебаний частиц. С ростом амплитуды колебаний длина волны уменьшается. Интересно отметить, что у поверхности кристалла до первого узла траектории образуют своеобразный "конус". В пределах этого конуса траектории, рассчитанные в рамках использованной модели, не пересекают плоскость окта-междоузлий.

На рис.3 показаны особенности эволюции перераспределения потока протонов в канале для нескольких значений глубины. На глубине 20 Å поток протонов в поперечной плоскости практически однороден. На глуби-

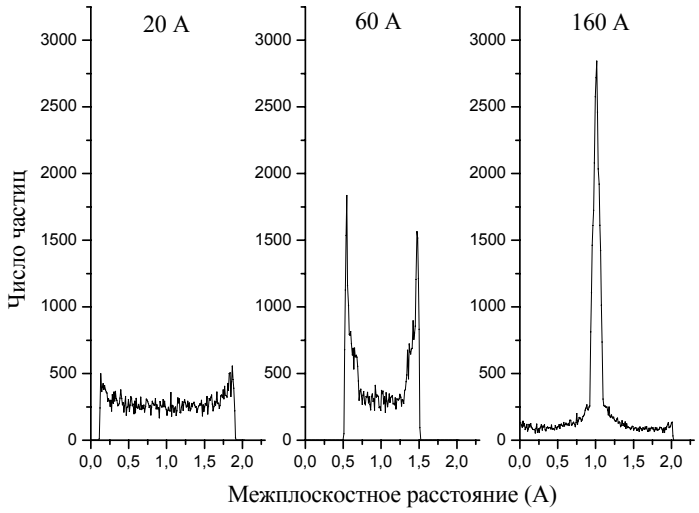

Рис.3. Распределение потока протонов (начальная энергия 1,7476 МэВ)
в поперечной плоскости плоскостного канала (111) на глубинах: 20, 60 и 160 Å.

не 60 Å протоны с малыми прицельными параметрами соударения уходят от атомных плоскостей, в результате чего образуются пики. В середине канала на этой глубине распределение протонов в поперечной плоскости остается близким к однородному, а по величине таким же, как и у поверхности. На глубине, где формируется узел траекторий протонов, как и следовало ожидать, основная доля протонов сосредоточена в середине канала (здесь, как отмечалось выше, располагаются окта-междоузлия). Слева и справа от пика – поток обусловлен протонами с большой амплитудой колебаний.

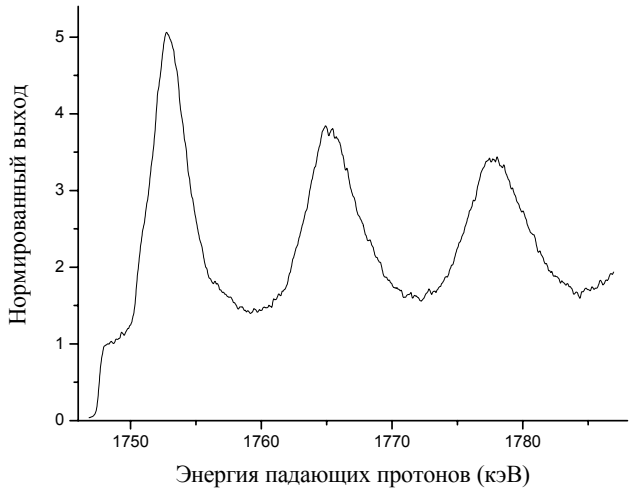

Рис.4. Зависимость выхода резонансных γ - квантов реакции $^{13}C(p, \gamma)^{14}N$ от энергии при каналировании протонов вдоль плоскости (111); $\varphi_{вх} = 0,0°$.
Угловая расходимость и разброс по энергии у протонов на входе в канал равны $\Delta\varphi_{вх} = 0,05°$; $\Delta E = 1,5$ кэВ, соответственно.

На рис.4 показана зависимость выхода γ-квантов реакции от энергии каналированных протонов. В соответствии с эволюцией траекторий и перераспределением потока каналированных протонов наблюдаются четко выраженные пики, которые образуются на глубинах, где основная доля траекторий протонов пересекает плоскость окта-междоузлий. Минимумы выхода γ-квантов соответствуют максимальному приближению траекторий протонов к атомным плоскостям, где поперечная кинетическая энергия у протонов равна или близка к нулевому значению, а потенциальная энергия максимальная. Высота пиков с увеличением глубины уменьшается за счет разфазировки и перемешивания траекторий протонов.

ВЫВОДЫ

Разработана программа компьютерного моделирования траекторий протонов, каналированных вдоль атомных плоскостей в кристалле. Программа основана на использовании выходов излучений резонансных реакций на ядрах, которые занимают определенные, известные позиции в решетке. Такой подход дает возможность получить значительно лучшее разрешение по энергии, чем в традиционном методе изучения ориентационных эффектов с помощью упругого рассеяния частиц. Программа использовалась для исследования эволюции перераспределения потока протонов в плоскостном канале монокристаллического раствора Ni + 0,18ат.%C. В расчете траекторий и распределения потока протонов в плоскостном канале (111) использовалась ядерная реакция $^{13}C(p, \gamma)^{14}N$, которая, при энергии протонов 1,7476 МэВ, имеет сильный, изолированный резонанс. Установлена ярко выраженная, “затухающая” с глубиной структура в зависимости выхода резонансных γ-квантов реакции из приповерхностной области кристалла от энергии каналированных протонов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. D.S. Gemmel. Channeling and related effects in the motion of charget particles through crystals. //Rev. Mod. Phys. -1974. -V.46, №1. -P.156-159.
2. J.H. Barrett. Methods of channeling simulation. //Nucl. Instr. and Meth. B44 -1990. -P.367-372.
3. K.P. Lieb, W. Bolse at all. Depth profiling of heavy-ion-mixed TiN films. //Nucl. Instr. and Meth. B50 -1990. -P.10-17.
4. B.R. Appleton, C. Erginsoy and M. Gibson. Channeling Effects in Energy Loss of 3-11 MeV Protons in Silicon and Germanium Single Crystals. //Phys. Rev. B. -1967. -V.161, №2. -P.330-349.
5. Dirck Van Vliet. On the spatial distribution of channeled ions. //Rad. Eff. -1971. -V.10. -P.137-155.
6. L.C. Feldman, J.W. Mayer, S.T. Picraux. Materials Analysis by Ion Channeling 1982, Academic, New York. -P.61.

COMPUTER MODELING OF PROTON CHANNELING IN CRYSTALS

N.A. Skakun, V.M. Shershnev, N.A. Shlyakhov
National Science Center “Kharkov Institute of Physics and Technology”,
1 Akademicheskaya St., Kharkov 61108, Ukraine
e-mail: skakun@kipt.kharkov.ua

The program of computer modeling of proton channeling trajectories in the line of atomic planes in a crystal has been developed. The redistribution of the proton flux density in a plane channel of the Ni + 0,18ат.%C monocrystal solution has been studied. To investigate orientation effects at channeling of positively charged particles, we offer the approach based on the use of radiation yields from resonant reactions on the nuclei of impurity atoms occupying certain positions in a crystal. It has been shown that the γ-yields of the $^{13}C(p, \gamma)^{14}N$ resonance nuclear reaction essentially depend on the energy of channeling protons.
KEY WORDS: channeling, nuclear reaction, nuclear resonance, location of impurity.