

УДК 539.12.04

РЕГУЛЯРНОЕ И СТОХАСТИЧЕСКОЕ ДВИЖЕНИЕ  
В КРИСТАЛЛЕ ПРИ КАНАЛИРОВАНИИ.  
ЭВОЛЮЦИЯ ПОТОКА ЧАСТИЦ  
В ТОЛСТОМ КРИСТАЛЛЕ

*А. Г. Кадменский*

ФГУП ЦНИИМАШ, Королев, Московская обл., Россия

*В. В. Самарин*

Чувашский государственный университет, Чебоксары, Россия

*А. Ф. Тулинов*

Научно-исследовательский институт ядерной физики им. Д. В. Скобельцына  
МГУ, Москва

ВВЕДЕНИЕ	824
МОДИФИКАЦИЯ МОДЕЛИ ЛИНДХАРДА И ДЕМОНСТРАЦИЯ КОЭФФИЦИЕНТОВ ДИФФУЗИИ, ПРЕВЫШАЮЩИХ НОРМАЛЬНЫЕ	826
РАЗВИТИЕ МОДЕЛИ ЛИНДХАРДА	830
СОСТОЯНИЕ КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ	834
МОДЕЛЬ КРИСТАЛЛА АТОМНЫХ ЦЕПОЧЕК	837
ЭФФЕКТЫ КРИСТАЛЛА ЦЕПОЧЕК	840
ВЛИЯНИЕ ПРОЦЕССОВ МНОГОКРАТНОГО РАССЕЯНИЯ	853
ЭВОЛЮЦИЯ ПОТОКА ЧАСТИЦ В КРИСТАЛЛАХ НА БОЛЬШИХ ГЛУБИНАХ	855
СРАВНЕНИЕ С РЕАЛЬНЫМИ ЭКСПЕРИМЕНТАМИ	860
ЗАКЛЮЧЕНИЕ	862
СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ	864

УДК 539.12.04

РЕГУЛЯРНОЕ И СТОХАСТИЧЕСКОЕ ДВИЖЕНИЕ  
В КРИСТАЛЛЕ ПРИ КАНАЛИРОВАНИИ.  
ЭВОЛЮЦИЯ ПОТОКА ЧАСТИЦ  
В ТОЛСТОМ КРИСТАЛЛЕ

*А. Г. Кадменский*

ФГУП ЦНИИМАШ, Королев, Московская обл., Россия

*В. В. Самарин*

Чувашский государственный университет, Чебоксары, Россия

*А. Ф. Тулинов*

Научно-исследовательский институт ядерной физики им. Д. В. Скобельцына  
МГУ, Москва

Компьютерные и аналитические исследования каналирования легких ионов с энергиями вплоть до релятивистских в «кристалле атомных цепочек» привели к существенной ревизии модели статистического равновесия Линдхарда. Модификация связана с существованием режима «двойного каналирования» — регулярного движения ионов между атомными рядами. «Нормальное каналирование» как режим случайного блуждания в поле атомных рядов допускает статистическое описание вследствие глобальной неустойчивости траекторий ионов. Показано, что фокусировка парами атомных цепочек приводит к увеличенному ядерному рассеянию и потерям энергии в угловой области, значительно превышающей угол Линдхарда. Тепловые колебания решетки приводят к переходам между вышеназванными режимами, причем двойное каналирование ведет себя как аттрактор при этой диффузии. На больших глубинах кристалла становится важным реканалирование ионов. Анизотропия угловых распределений, картина «канализованных звезд», является характерной особенностью на этих глубинах. Для начальных условий случайного движения объемное реканалирование является причиной появления сверххвостов в распределениях пробегов ионов.

The analytic and simulation study of ion channelling in «atomic string crystal» results in significant revision of Lindhard statistical model. The modification consists in accounting for «double channeling» regime — the regular motion between atomic rows. The «normal channeling», having a character of the random walk in the field of atomic string, admits the description in statistical frames which reflects the global instability of ion trajectories. It is shown that the focusing by pairs of atomic strings results in increased intensity of nuclear scattering and electron stopping of ions in an angular range essentially exceeding Lindhard angle. The lattice thermal vibrations result in intertransitions between the named above regimes; the double channeling plays a role of attractor in this diffusion. At large depths the rechanneling becomes important. Also the anisotropy in angular distributions, the «star» patterns, is a characteristic feature at these depths. The volume rechanneling is a cause of the super-tail appearance in an ion range distributions for random motion initial conditions.

## ВВЕДЕНИЕ

Каналирование [1, 2] заряженных частиц и ионов и эффект теней (блокировки) [3–5] в кристаллах, открытые в 60-х гг. прошлого столетия, показали важность учета структуры мишени [6–8] при значениях энергий, значительно превосходящих границы дифракционных явлений и простирающихся вплоть до релятивистских значений. Эти связанные между собой эффекты предоставили ряд новых, а теперь широко известных и применяемых в лабораториях мира экспериментальных методов исследования. В качестве примеров укажем обратное резерфордское рассеяние в сочетании с каналированием [9] для экспрессного и неразрушающего исследования поверхностных свойств и структурного совершенства кристаллов, использование кристалла для измерения времени протекания ядерных реакций [10, 11] и для определения потерь энергии в зависимости от прицельного параметра при столкновении с атомом [12], а также как генератора мощного когерентного излучения при каналировании релятивистских частиц [13] и др. В частности, на основе каналирования предложены [14] и осуществлены в ОИЯИ неожиданные технические решения, связанные с заменой многотонного электромагнита изогнутым кристаллом для сепарации и поворота релятивистских пучков.

По затронутым вопросам существует обширная библиография, из которой выше отмечены пионерские работы первооткрывателей и первые монографии и обзоры, дающие представление о физике ориентационных эффектов в кристаллах, в частности, [15, 16].

В теоретических исследованиях каналирования легких ионов мегаэлектронвольтных энергий широко используется модель Линдхарда (далее МЛ) [6], вводящая непрерывный потенциал атомных цепочек (АЦ) для осевого каналирования и непрерывный потенциал атомных плоскостей — для плоскостного. Описание основных процессов рассеяния при движении классической заряженной частицы в кристалле с квантовыми особенностями его электронно-фононной системы проводится в рамках статистического подхода, связанного с введением нового квазиинварианта — энергии поперечного относительно направления канала движения каналированного иона, и при использовании гипотезы о быстром фазовом перемешивании на гиперповерхности поперечной энергии. Были сформулированы в условиях статистического равновесия аналитические уравнения типа угловой диффузии или Фоккера–Планка [17–19] в укороченном фазовом пространстве поперечного относительно направления канала движения. Далее для краткости будем использовать определения «поперечное», «поперечный» для этого фазового пространства и связанных с ним динамических переменных, а также применять в обозначениях нижний индекс  $\perp$ .

В свете современных представлений [20] можно констатировать, что и обсуждение при теоретическом описании, и постановка экспериментов, как

правило, сводятся к двум крупным классам явлений — предпочтительному проявлению осевой или плоскостной ориентации кристалла при каналировании и блокировке. Отметим, что при осевом каналировании обоснование возможности перемешивания ионов в поперечном фазовом пространстве для наступления статистического равновесия Линдхард [6], а позже Головченко [21] и Кумахов и Белошицкий [15] проводили для неупорядоченной среды АЦ (далее — «газ АЦ»). Поэтому осевое каналирование рассматривается отдельно от плоскостного, хотя ряд экспериментальных фактов и компьютерных расчетов выпадают из этого правила. Так, в эксперименте выход обратного рассеяния при осевом каналировании обладает развитой азимутальной структурой, понимаемой как проявление атомных плоскостей кристалла [8]. Азимутальная неоднородность наблюдается и в характерных для каналирования кольцеобразных распределениях за кристаллом (о них подробно пойдет речь далее).

Одновременно отметим, что гипотеза статистического равновесия была подвергнута критике по результатам компьютерного моделирования [22, 23] в связи с наблюдением пространственной фокусировки упорядоченно расположенными АЦ перед деканалированием. При интерпретации резонансных явлений, наблюдаемых в условиях перехода ось–плоскость при каналировании (так называемое резонансное деканалирование, см., например, [24]), математическое моделирование в качестве причины неустойчивости выявило фокусирующие столкновения с АЦ, лежащими в атомных плоскостях [25, 26].

Далее в работе остановимся на проблеме влияния упорядоченного расположения АЦ в кристалле (т. е. проявления плоскостной структуры при осевом каналировании). Актуальна также проблема теплового усреднения при вычислении ядерного вклада в многократное рассеяние, поскольку экспериментально в осевом случае наблюдается более сильное рассеяние, чем МЛ предсказывает, а модельная скорость изменения поперечной энергии из-за рассеяния на ядрах атомов, участвующих в тепловом движении, неограниченно возрастает при увеличении поперечной энергии или температуры.

Упорядоченное расположение АЦ кристалла требует исследования уравнений движения каналированных ионов в суммарном нелинейном и периодичном непрерывном потенциале («кристалле» АЦ), что сводит задачу рассеяния ионов в кристалле к широко обсуждаемым в последнее время проблемам нелинейной динамики [27, 28] и требует привлечения численных методов, в частности, развитых при исследовании каналирования с использованием компьютеров [23, 25, 29–31]. Для определенной части каналированных ионов эффективным является приближение бинарных столкновений иона с АЦ (БСАЦ) [32, 33], на основе которого создано специальное программное обеспечение моделирования с привлечением аналитического описания столкновения иона с отдельной атомной цепочкой [32, 35, 38, 39] и проведены рассмотренные ниже исследования.

Структура работы следующая. В разд. 1 описаны результаты модификации модели Линдхарда и ее развитие в рамках метода интегрирования по траектории иона в поле атомных цепочек кристалла. В разд. 2 представлены используемые модели каналирования при компьютерном моделировании, а также некоторые результаты моделирования в трехмерном кристалле по влиянию атомных плоскостей на осевое каналирование. В разд. 3 по результатам проведенных расчетов в «кристалле» атомных цепочек рассмотрено поведение автокорреляционной функции в пространстве поперечных импульсов, которое показывает нарушение гипотезы Линдхарда, и проведено разделение каналированного потока на две соизмеримые в фазовом пространстве фракции: динамического хаоса и регулярной динамики (двойного каналирования). Свойства этих фракций по результатам моделирования и с привлечением сечений Пуанкаре [33, 34] в сопоставлении с аналитическими результатами для газа АЦ [39] описаны в разд. 4. В разд. 5 показана динамика перераспределения потоков в «толстом» (сравнимом по толщине с нормальным проецированным пробегом  $R_p$ ) кристалле с демонстрацией [37] объемного реканалирования (переход случайное движение–каналирование) и переходов нормальное каналирование–двойное каналирование. В разд. 7, 8 описаны эксперименты, подтверждающие полученные результаты. В заключении подведены итоги исследований.

## 1. МОДИФИКАЦИЯ МОДЕЛИ ЛИНДХАРДА И ДЕМОНСТРАЦИЯ КОЭФФИЦИЕНТОВ ДИФФУЗИИ, ПРЕВЫШАЮЩИХ НОРМАЛЬНЫЕ

Разработанный метод усреднения [37, 41] по тепловому движению атомов кристалла в рамках модели статистического равновесия (se) позволил получить скорость изменения поперечной энергии  $E_{\perp}$  с глубиной вдоль направления  $z$  исследуемой кристаллографической оси вследствие упругого рассеяния частиц на ядрах атомов в виде

$$\left\{ \frac{\delta E_{\perp}}{\delta z}(\varepsilon_{\perp}) \right\}_T^{\text{se}} = E \left\{ \frac{\delta \Omega_n^2}{\delta z} \right\}_R \gamma_n(\varepsilon_{\perp}), \quad \gamma_n(\varepsilon_{\perp}) = \eta_1 \gamma_{nL} + \eta_2, \quad (1)$$

где величина  $\gamma_{nL}(\varepsilon_{\perp})$  — функция Линдхарда [6]:

$$\gamma_{nL} = u_{\perp}^2 / (3a_{\text{TF}}^2 L_n) (\exp(\varepsilon_{\perp}) + 2/3) (1 - \exp(-\varepsilon_{\perp}))^3, \quad (2)$$

$$\eta_1(r_m) = 1 - \eta_2(1 + r_m^2/u_{\perp}^2), \quad \eta_2 = \exp(-r_m^2/u_{\perp}^2), \quad (3)$$

$\left\{ \delta \Omega_n^2 / \delta z \right\}_R$  — темп изменения среднего угла многократного ядерного рассеяния для случайного движения в кристалле (для «random»-режима);  $\varepsilon_{\perp} =$

$2E_{\perp}/(E\theta_L^2) \approx 2\theta_0^2/\theta_L^2$  — безразмерная поперечная энергия, при записи которой использованы  $\theta_L \equiv \psi_1$  — критический угол Линдхарда и полярный угол  $\theta_0$  падения частицы относительно оси АЦ;  $u_{\perp}(T)$  — среднеквадратичная амплитуда поперечных колебаний атомов при температуре  $T$  кристалла;

$$r_m^2(\varepsilon_{\perp}) = \frac{3a_{\text{TF}}^2}{\beta \exp(\varepsilon_{\perp}) - 1}, \quad \beta \approx 1 + \frac{3a_{\text{TF}}^2}{r_0^2}, \quad r_0^2 = \frac{1}{\pi N d}, \quad (4)$$

где  $r_m(\varepsilon_{\perp})$  — значение поперечной координаты  $r_{\perp} \equiv r$  при максимальном приближении иона с поперечной энергией  $\varepsilon_{\perp}$  к оси АЦ (т.е. корень уравнения  $\varepsilon_{\perp} = U_1(r_m)$ , где  $U_1(r_{\perp})$  — непрерывный потенциал Линдхарда);  $a_{\text{TF}}$  — радиус экранирования Томаса–Ферми;  $r_0$  — радиус ячейки Вигнера–Зейтца для каналирования;  $N$  — атомная плотность кристалла;  $d$  — период кристалла вдоль выбранной кристаллографической оси.

Результат (1) при малых поперечных энергиях переходит в результат Линдхарда [6]. Одновременно отметим, что с точностью до замены  $\eta_1 \rightarrow 1$  он совпадает с результатами Китагавы–Оцуки [42] (см. также [16, 43]), где при квантовом рассмотрении первое слагаемое интерпретировалось как следствие предела однофононных, а второе — предела многофононных процессов возбуждения кристалла, а сам результат представляет их прямую сумму. Полученное из чисто классических соображений выражение (1) уточняет рассмотрение, представляя непрерывную функцию от поперечной энергии. При этом первый член соответствует скоррелированному рассеянию частицы большим количеством атомов цепочки и при малых поперечных энергиях преобладает; при увеличении  $\varepsilon_{\perp}$  основную роль играет второй член, который описывает одноатомное рассеяние, характерное для неупорядоченной среды. Полученные результаты существенно уточняют подходы, развитые в последние годы [20, 44–46]. Так, (1) заменяет использованную в [44, 45] прямую сумму двух асимптотических значений скорости изменения поперечной энергии — по Линдхарду и Китагаве–Оцуки с выходом при  $\varepsilon_{\perp} > \varepsilon_{\perp B}$  на постоянное значение для случайного движения:

$$\gamma_n = \begin{cases} \gamma_{nL} + \eta_2, & \varepsilon_{\perp} < \varepsilon_{\perp B}, \\ 1, & \varepsilon_{\perp} \geq \varepsilon_{\perp B}, \end{cases} \quad \varepsilon_{\perp B} \approx \ln \left( 1 + \frac{6a_{\text{TF}}^2}{u_{\perp}^2} \right), \quad (5)$$

где  $\varepsilon_{\perp B}(T)$  — широко используемая в литературе оценка [19] зависящей от температуры граничной энергии перехода от каналирования к случайному движению.

Использование (5) приводило в [44] к расчетной скорости деканалирования в осевых каналах германия, которая значительно меньше значений, наблюдаемых в эксперименте. Аналогичная ситуация наблюдается при использовании (5) в осевых каналах золота [45].

Вместе с тем прямое компьютерное моделирование [39] рассеяния протонов изолированным атомным рядом германия и золота, при учете тепловых колебаний его атомов, как в бесконечном кристалле, позволяет получить статистически равновесные характеристики каналирования, в частности  $\gamma_n$ , на основе доказанного эргодического свойства газа АЦ [40], которое рассмотрим ниже. В качестве примера такого рода на рис. 1 приведен результат расчета безразмерного темпа изменения поперечной энергии  $\gamma_n(\varepsilon_\perp)$  для протонов с энергией 500 кэВ и набора главных осевых каналов золота в широком интервале температур. Аналитическое выражение (1) вместе с кривой Линдхарда (2) также показаны на рисунке, и можно сделать вывод о высоком уровне точности и универсальности первого.

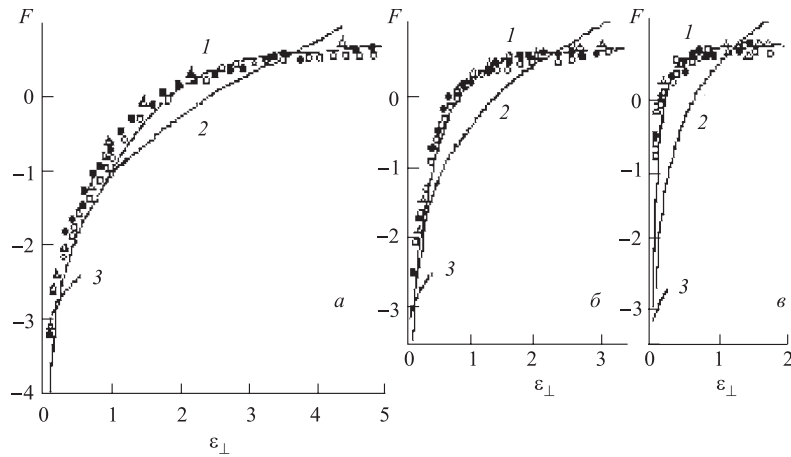


Рис. 1. Расчет среднего темпа многократного рассеяния на ядрах атомов для статистического равновесного распределения каналированных частиц (1) в безразмерных координатах (кривая 1)  $F = \frac{\langle \delta\Omega_n^2 / \delta z \rangle_{se}}{\varepsilon \pi N a_{TF}^2}$ ,  $\varepsilon = \frac{E a_{TF}}{Z_1 Z_2 e^2} \frac{M_2}{M_1 + M_2}$  в широком диапазоне поперечных энергий  $\varepsilon_\perp$  при разных температурах. Использованные значения для среднеквадратичных поперечных смещений атомов из узлов решетки  $u_\perp/a_{TF}$ : 0,532 (а); 1,33 (б); 2,66 (в). Результаты компьютерного моделирования для протонов с энергией 500 кэВ в каналах  $\langle 100 \rangle$  (светлые кружки),  $\langle 110 \rangle$  (темные кружки) и  $\langle 111 \rangle$  (светлые треугольники) монокристалла золота (решетка ГЦК) показаны при температурах: 48 К (а); 293 К (б); 1200 К (в);  $a_{TF} = 0,0109$  нм. При моделировании выбиралось  $\theta_{max} = 0,2$ . Для сравнения показана функция Линдхарда (2) (кривая 2) и темп многократного рассеяния электронами кристалла (формула (21) из [39]) (кривая 3)

При выводе (1), как и в МЛ, используется функция гауссовского распределения  $f_G(r, u_\perp)$  тепловых смещений атома из узла решетки без учета

возможной скоррелированности тепловых смещений атомов — близких соседей по атомной цепочке. При рассмотрении таких корреляций, которые значительны для относительно малого числа  $L$  ( $L \leq 5$ ) атомов-соседей [47], получим [39, 48, 49], что в (1) необходимо внести поправочные множители, превышающие единицу, в оба члена. При малых поперечных энергиях это увеличивает многократное рассеяние (по дебаевским оценкам) в несколько раз или в два раза при  $L = 2$ , как это подтверждается компьютерным моделированием [30] в области достаточно малых ( $\varepsilon_{\perp} < 2$ ) поперечных энергий. В [49] при анализе экспериментов по деканализированию протонов в монокристаллах германия в рамках модели монотонного возрастания поперечной энергии для тонких анализируемых слоев была подтверждена температурная зависимость, следующая из (1), что означало значительное продвижение к более точному описанию эксперимента по сравнению с [44]. При этом, используя  $\eta_1 = 1$  и не учитывая второй член в (1), результаты [49] требовали дальнейших уточнений.

Более точная расчетная модель деканализирования использовалась в [38], где был разработан метод аналитической функции Грина для задачи Коши уравнения Бондрупа и др. [19] с учетом торможения протонов. Расчет с применением (1) и учетом корреляций при  $L = 2$  позволил удовлетворительно описать зависимость выхода обратного рассеяния при каналировании протонов в широком диапазоне энергий и на толщине слоев, где изменение начальной энергии иона значительно, по результатам независимых экспериментов в кристаллах вольфрама и германия, выполненных различными группами. Для германия использовались данные Мацунами–Хоу [44].

Во втором члене в (1) учет тепловых корреляций приводит к появлению кратных столкновений с атомами, разделенными малым расстоянием  $\sim d$ , причем реализующими любые, включая малые, прицельные параметры. Это означает присутствие повышенных скоростей ядерных потерь энергии (скорости дефектообразования) и многократного рассеяния по сравнению с нормальными. В итоге ядерное рассеяние в значительной области поперечных энергий, заметно выходящих за  $\varepsilon_{\perp B}(T)$ , превышает уровень [50], соответствующий случайному движению. Пример расчета ядерного рассеяния приведен на рис. 2, где вместе с результатом Линдхарда показан  $\gamma_n$  (1) и его парциальные компоненты, а также произведен учет в дебаевском приближении влияния скоррелированности тепловых смещений атомов ближайших соседей по атомной цепочке и использован выбор максимального угла при многократном рассеянии в соответствии с рекомендациями [44]:  $\theta_{\max} = \theta_L$ . Расчет проведен в различных моделях: I — с параметрами Линдхарда [6]  $\theta_{\max} = 1,228$ ,  $L_n = 4,124$ ; кривые 1 — функция Линдхарда  $\gamma_L$  (2); 2 — функция  $\gamma_{n1} = \eta_1 \gamma_L$ , выделяющая многоатомное рассеяние; 3 — функция  $\gamma_{n2c} = \eta_2$ ; 4 — функция  $\gamma_n = (\eta_1 \gamma_L + \eta_2)$ ; II —  $\theta_{\max} = 0,2$  и  $L_n = 2,309$ ; учет корреляций (отмечено индексом  $c$ ) в тепловых смеще-



ниях атомов — ближайших соседей по атомной цепочке; кривые 5 —  $\gamma_L$ ; 6 —  $\gamma_{n1}$ ; 7 —  $\gamma_{n1c}$ ; 8 —  $\gamma_{nc} = (\gamma_{n1} + \gamma_{n2})_c$ ; III —  $\theta_{\max} = \theta_L = 0,033$  и  $L_n = 0,507$ ; учет корреляций, как в расчете II; кривые 9 —  $\gamma_L$ ; 10 —

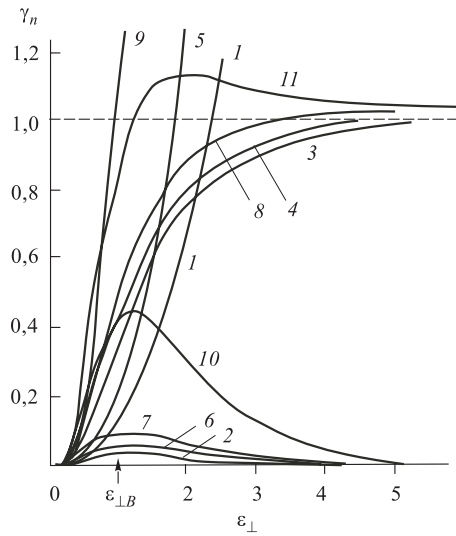


Рис. 2. Безразмерный вклад рассеяния  $\gamma_n$  на ядрах атомов кристалла золота, колеблющихся с относительной амплитудой поперечных колебаний  $\sqrt{\langle u_{\perp}^2 \rangle} / a_{TF} = 1,33$  (температура 293 К), в коэффициент динамического трения протонов с энергией 500 кэВ при движении в канале  $\langle 100 \rangle$  в зависимости от безразмерной поперечной энергии  $\epsilon_{\perp}$

значения фактора  $\gamma_n$  ядерного рассеяния и в два раза — электронного торможения. Проведенное выше уточнение решает эту проблему, но, как будет показано далее, лишь частично.

## 2. РАЗВИТИЕ МОДЕЛИ ЛИНДХАРДА

Как альтернатива усреднению по статистическому равновесному распределению Линдхарда, был разработан метод усреднения вдоль оси  $z$  по совокупности траекторий в поле АЦ  $r = r(\epsilon_{\perp}, b_{\perp}, z)$ , где  $b_{\perp}$  — прицельный параметр частицы при столкновении с АЦ [39]. Эквивалентность двух ме-

функций  $\gamma_{n1c}$ ; 11 —  $\gamma_{nc}$ . Значение  $\epsilon_{\perp B}(T)$  отмечено стрелкой. Отметим, что учет корреляций пяти близких соседей приводит к дальнейшему увеличению рассеяния [50].

Проведено тепловое усреднение и других характеристик каналирования. В частности, оказалось, что электронные потери энергии после усреднения [39] превышают оценку Линдхарда [6], становятся зависимыми от температуры кристалла и растут с ее увеличением, что качественно подтверждается экспериментами для плоскостного каналирования [51].

Расчеты на основе МЛ деканалирования, представленные в литературе (см., например, [19, 44, 45]), при сравнении с экспериментальными результатами демонстрируют систематическое отклонение в сторону занижения эффекта рассеяния. При этом для достижения приемлемого согласия проводится [44] увеличение (без физической аргументации) в четыре раза

тодов усреднения наблюдается при выполнении своеобразного эргодического правила [40], требующего равномерного распределения прицельных параметров  $b_{\perp}$  столкновения с АЦ в диапазоне  $0 \div r_0$ . Это свойство дало новый репер для характеристики потока каналированных частиц, который мы используем далее.

Сама траектория движения может быть приближенно построена методом, сходным с примененным Фирсовым [52]. Интегрирование по траектории позволяет аналитически описать результат рассеяния частицы атомной цепочкой в зависимости от поперечной энергии и прицельного параметра  $b_{\perp}$  для всех важных для каналирования величин (потерь энергии на электронах и связанного с ними угла многократного рассеяния, выхода обратного рассеяния, ядерного вклада в многократное рассеяние, а также азимутального угла рассеяния  $\Delta\varphi$  и переносной длины траектории  $\Delta z(b_{\perp}, \varepsilon_{\perp})$  — длины участка бесконечной АЦ вдоль ее оси  $z$ , принимающего участие в рассеянии иона с параметрами  $b_{\perp}, \varepsilon_{\perp}$ ). В частности, при одном столкновении частицы с АЦ среднее изменение квадрата угла многократного рассеяния частицы на ядрах атомов, участвующих в тепловом движении,  $\Delta\Omega_n^2$  записывается следующим образом [39, 41]:

$$\Delta\Omega_n^2(\varepsilon_{\perp}, b_{\perp}, u_{\perp}) = \left\{ \frac{\delta\Omega_n^2}{\delta z} \right\}_R m_{\Omega n} \Delta z, \quad (6)$$

$$m_{\Omega n} = \frac{\langle \Delta z \rangle}{\Delta z} \left[ \eta_1 \frac{9u_{\perp}^2 a_{\text{TF}}^2}{L_n} (p_1 + p_2 + p_3) + \frac{2r_0 \eta_2}{\sqrt{\pi u_{\perp}^2}} \exp\left(-\frac{b_{\perp}^2}{u_{\perp}^2}\right) \right],$$

$$p_1 = \frac{2r_{mb}^2 + 3a_{\text{TF}}^2 + 3r_{mb}^2 R_c}{2R_c^3 r_{mb}^3 (r_{mb} + R_c)^3}, \quad p_2 = \frac{11r_{mb}^2 + 24a_{\text{TF}}^2 + 9r_{mb}^2 R_c}{4R_c^5 r_{mb} (r_{mb} + R_c)^3}, \quad (7)$$

$$p_3 = \frac{5}{8R_c^7}, \quad R_c = r_{mb}^2 + 3a_{\text{TF}}^2, \quad r_{mb}^2 \approx r_m^2 + b_{\perp}^2.$$

Здесь дополнительно использованы величины кулоновского логарифма при описании многократного рассеяния  $L_n$ , длины участка бесконечной цепочки вдоль оси  $z$ , участвующего в столкновении,  $\Delta z$  и ее среднее значение  $\langle \Delta z \rangle$  по равномерному распределению прицельных параметров:

$$\langle \Delta z \rangle = \frac{1}{r_0} \int_0^{r_0} \Delta z(\varepsilon_{\perp}, b_{\perp}) db_{\perp} = \frac{\pi(r_0^2 - r_m^2)}{2r_0 \theta_0}. \quad (8)$$

При учете скоррелированности тепловых смещений атомов цепочки в (6), (7) при  $\eta_1$  и  $\eta_2$  следует ввести соответствующие корреляционные поправки [39].

Полученные формулы сравнивались с результатами моделирования на ЭВМ рассеяния быстрых протонов изолированной АЦ кристалла в приближении бинарных столкновений с атомами с потенциалом взаимодействия Мольера и Линдхарда [39, 41] (рис. 3), и они показали высокую степень согласия в широком диапазоне вариации параметров частицы и кристалла.

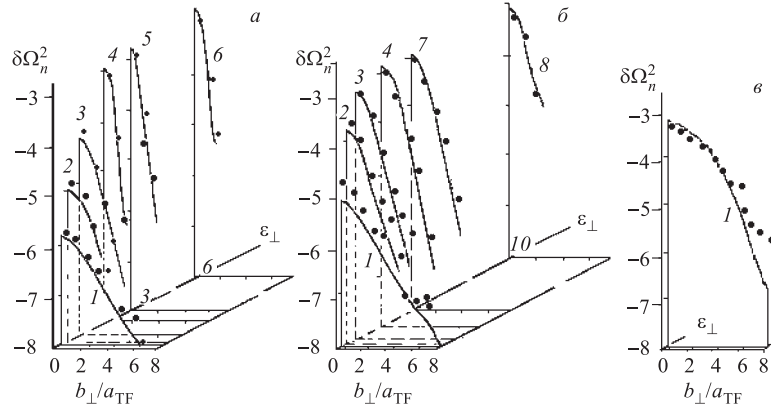


Рис. 3. Расчет дисперсии распределения по полярным углам при однократном столкновении частиц с атомной цепочкой кристалла в зависимости от безразмерного прицельного параметра  $b_{\perp}/a_{TF}$  ( $\epsilon$ ) для различных поперечных энергий  $\epsilon_{\perp} = 0,25$  (1); 0,55 (2); 1,0 (3); 2,0 (4); 3,0 (5); 3,6 (6); 6,0 (7); 10,0 (8). Учен фактор ядерного рассеяния частиц, определяемого тепловым движением атомов АЦ при различных температурах кристалла: 48 К (а); 293 К (б); 1200 К (в). Точками показаны результаты моделирования рассеяния протонов с энергией 500 кэВ атомной цепочкой  $\langle 111 \rangle$  золота  $\Delta\Omega_n^2 = \langle \theta_{out}^2 \rangle - \theta_{in}^2$ . Радиус экранирования потенциала Томаса–Ферми–Мольера, использованного при моделировании,  $a_{TF} = 0,0109$  нм

Как известно, непрерывный потенциал Линдхарда  $U_1(r)$  (как потенциал заряженной нити) описывает поворот плоскости движения иона вокруг АЦ с изменением азимутального угла в зависимости от прицельного параметра столкновения с атомной цепочкой в диапазоне  $\varphi = 0 \div \pi$ . Полярный угол  $\theta_0$  импульса иона с осью бесконечной АЦ при рассеянии непрерывным потенциалом в соответствии с сохранением поперечной энергии  $E_{\perp} \cong E\theta_0^2 \sim \text{const}$  при этом квадратично сохраняется, обеспечивая общий кольцеобразный вид углового распределения ионов после рассеяния. Как важный вывод, отметим, что непрерывный потенциал Линдхарда  $U_1(r)$  описывает рассеяние изолированной АЦ с изменением азимутального угла достаточно точно при наличии теплового движения атомов кристалла в широком диапазоне температур кристалла. Если использовать двумерное угловое распределение  $N(\epsilon_{\perp}, b_{\perp}; \theta, \varphi)$  рассеянных атомной цепочкой частиц, то справедливо соотношение  $\sqrt{\langle \varphi^2 \rangle} \cong$

$\varphi(\varepsilon_{\perp}, b_{\perp})$ , где  $\langle \varphi^2 \rangle = \int \theta d\theta \int N(\varepsilon_{\perp}, b_{\perp}; \theta, \varphi) \varphi^2 d\varphi$  — второй парциальный момент распределения, связанный с азимутальным рассеянием;  $\varphi(\varepsilon_{\perp}, b_{\perp})$  — аналитическое решение задачи рассеяния для непрерывного потенциала (см. рис. 4). В качестве достаточно хорошего приближения можно считать, что при фиксированном в этом распределении азимутальном угле полярные углы распределены нормально с дисперсией, даваемой (6). Использованное в (6) значение длины цепочки  $\Delta z$ , участвующей в столкновении, по результатам аналитических расчетов и моделирования приведено на рис. 5.

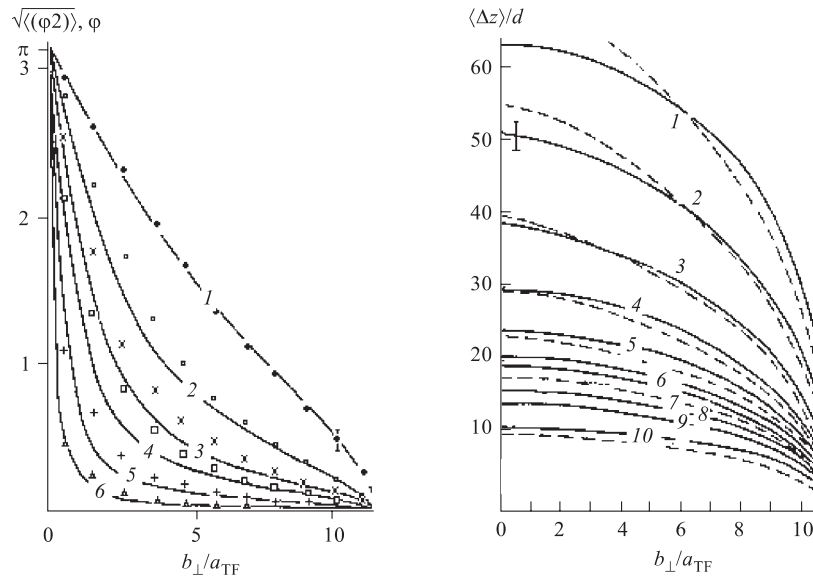


Рис. 4. Зависимость азимутального угла  $\varphi$  рассеяния частицы атомной цепочкой монокристалла от безразмерного прицельного параметра  $b_{\perp}/a_{TF}$  (сплошные кривые). Точки и другие значки представляют значения среднеквадратичного азимутального угла рассеяния при расчете методом Монте-Карло для различных начальных полярных углов импульса частицы относительно оси  $\langle 100 \rangle$  монокристалла золота:  $\theta_0 = 0,005$  (1); 0,010 (2); 0,015 (3); 0,020 (4); 0,033 (5); 0,047 (6). Температура кристалла 293 К, энергия протонов 500 кэВ, критический угол Линдхарда  $\theta_L = 0,0334$

Рис. 5. Безразмерная средняя длина взаимодействия частицы с атомной цепочкой в зависимости от безразмерного прицельного параметра столкновения  $b_{\perp}/a_{TF}$  на примере расчета для протонов с энергией 500 кэВ, рассеянных цепочкой  $\langle 100 \rangle$  золота ( $\theta_L = 0,0334$ ) при температуре 293 К. Сплошные кривые — расчет Монте-Карло; штриховые — согласно (25) [39]. Значения начального полярного угла частицы с осью АЦ:  $\theta_0 = 0,005$  (1); 0,010 (2); 0,015 (3); 0,020 (4); 0,025 (5); 0,030 (6); 0,033 ( $\theta_L$ ) (7); 0,041 (8); 0,047 (9); 0,058 (10)

Таким образом, сопоставление аналитических выражений для изменения динамических функций при столкновении иона с АЦ с результатами моделирования показало высокую степень согласия при значительном варьировании температур и для представительного набора кристаллографических направлений различных кристаллов, в частности, как это видно из приведенных примеров. При этом аналитические характеристики оказались справедливыми в широком диапазоне начальных полярных углов  $\theta_0$  падения потока относительно оси АЦ, далеко выходящем за пределы критического угла каналирования  $\theta_L$  Линдхарда (критической поперечной энергии), т. е. показали способность с единых позиций описывать и режим каналирования, и режим неуправляемого движения в кристалле. В последующих расчетах с использованием «кристалла» АЦ эти формулы образуют аналитическую основу описания рассеяния частиц укрупненным рассеивающим центром — атомной цепочкой. Рассматриваемая далее модель явным образом будет использовать и непрерывный эффективный потенциал Линдхарда для описания упругого столкновения ионов с АЦ.

### 3. СОСТОЯНИЕ КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Начиная с пионерской работы Робинсона и Оуэна [1], в которой при компьютерном моделировании было открыто явление каналирования, наряду с

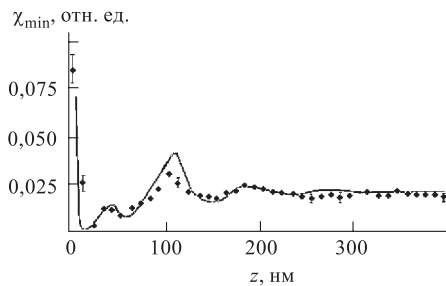


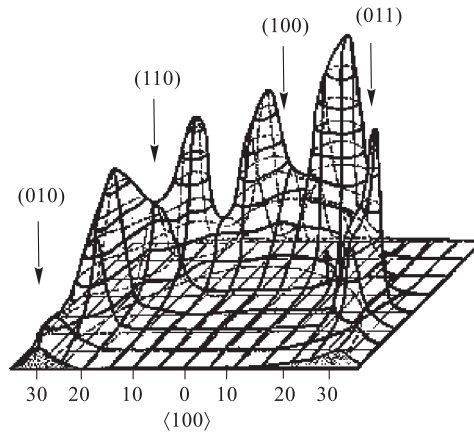
Рис. 6. Выход обратного рассеяния приповерхностных слоев кристалла вольфрама в зависимости от толщины по результатам компьютерного моделирования Барретта [22] в модели бинарных столкновений с атомами кристалла (сплошная кривая) и по модели бинарных столкновений с атомными цепочками (точки)

формированием аналитических теоретических моделей развивалось компьютерное моделирование прохождения ионов через кристалл, главным образом, методом статистических испытаний, результаты которого представлены в значительном количестве публикаций различных авторов (Морган и Ван Влит [7], Эльтеков и Мартыненко [29], Рябов [20] и др.). Особое место заняли работы Барретта [22, 23], развившего метод сопряженных блужданий для исследования обратного рассеяния каналированных частиц и выступившего с резкой критикой гипотезы статистического равновесия в связи с наблюдением на ЭВМ эффектов фокусировки при поперечном дви-

жении каналированных частиц, в последующем рассеянных на большой угол. Отмеченные в [22] эффекты фокусировки потока ионов системой АЦ кри-

сталла (рис. 6) наблюдались также для другой группы ионов при компьютерном моделировании перехода ось–плоскость при каналировании и использовались при интерпретации результатов наблюдаемого при этом резонансного деканалирования [25, 26].

Рис. 7. Фрагмент углового распределения типа «кольцо» протонов с энергией 500 кэВ, прошедших слой  $\Delta z = 100d$  (41 нм) монокристалла золота в осевом канале  $\langle 100 \rangle$  при температуре 300 К. Толщина слоя превышала длину наступления статистического равновесия Линдхарда ( $\Delta z > \lambda_1$ ). Стрелкой отмечено направление падения пучка на кристалл ( $\theta_0 = 0,7\theta_L$ ,  $\varphi_0 = 17^\circ$  относительно плотноупакованной атомной плоскости (100)), а также направления атомных плоскостей. Статистика — 45000 частиц



В работах [30, 53] методом Монте-Карло в приближении бинарных столкновений ионов с атомами кристалла (БСАК) исследовалось распределение типа «кольцо», наблюдаемое за тонким кристаллом в геометрии на прохождение, которое, как представляется, является наиболее полным для выяснения особенностей транспорта каналированных частиц. В осевых каналах  $\langle 100 \rangle$ ,  $\langle 111 \rangle$  Au при толщинах пройденного слоя, соответствующих длине наступления статистического равновесия Линдхарда  $\lambda_1$ , для протонов с энергией 500 кэВ наблюдалась значительная анизотропия распределения поперечных импульсов, противоречащая представлениям фазового перемешивания в его модели [6], но соответствующая данным эксперимента [53–55]. Кольцо имело четкую азимутальную структуру с проявлением азимутальных теней от атомных плоскостей (рис. 7) также в соответствии с экспериментом. Кроме того, зависимость от длины канала автокорреляционной функции в импульсном пространстве (см. подробнее в разд. 5) определяется ориентацией плоскости сканирования пучка на поверхности кристалла относительно его главных атомных плоскостей, содержащих исследуемое осевое направление (рис. 8). Наконец, при исследовании температурной зависимости углового распределения каналированных в осевом канале частиц с повышением температуры кристалла до 720 К была зафиксирована группа частиц с аномальным

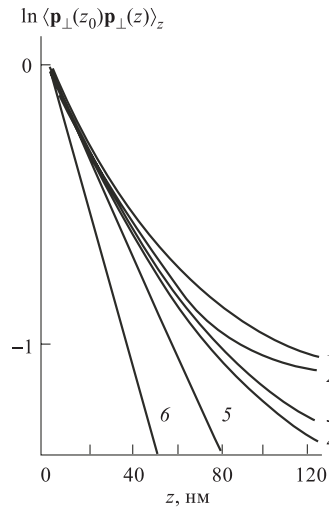


Рис. 8. Поведение автокорреляционной импульсной функции потока частиц  $\xi(z) = \ln \langle \mathbf{p}_\perp(0) \mathbf{p}_\perp(z) \rangle_z$  при движении в осевом канале  $\langle 111 \rangle$  монокристалла золота протонов с энергией 500 кэВ по результатам моделирования: 1, 2 — плоскость сканирования пучка на поверхности кристалла совпадает с атомной плоскостью (121); 3, 4 — при произвольном положении плоскости сканирования пучка; 2, 4 — учитываются частицы, прошедшие через кристалл с поперечной энергией  $\varepsilon_\perp = \varepsilon_{\perp 0} = 2$ ; 1, 3 — учитываются все частицы ( $\varepsilon_\perp \geq \varepsilon_{\perp 0}$ ). Температура кристалла 300 К. Для сравнения показаны результаты для модели хаотического расположения АЦ: 5 — расчет Монте-Карло с учетом влияния теплового движения атомов кристалла; 6 — расчет по формуле Линдхарда [6]

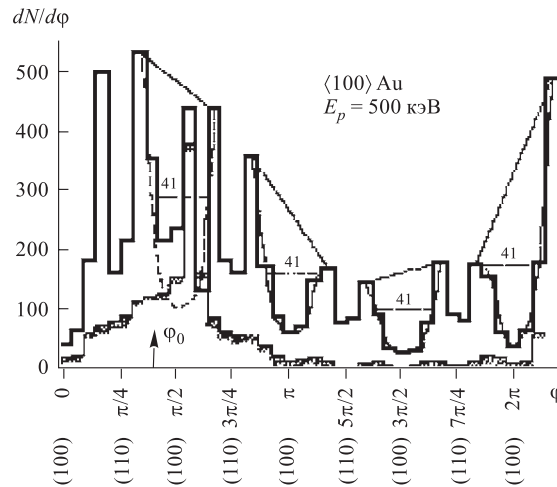


Рис. 9. Азимутальная развертка двумерного распределения (рис. 7) над кольцом  $\theta^2 = \theta_0^2$  при двух значениях температуры: 0 К (в отсутствие тепловых колебаний) и 720 К

поведением (рис. 9), последующие исследования которой привели к идентификации режима двойного каналирования [35]. На рис. 9 структура азимутальных теней от атомных плоскостей  $\{100\}$  характеризуется постоянной полушириной (41 мрад). При повышении температуры аномальный пик, находящийся внутри азимутальной тени атомной плоскости, ближайшей к плос-

кости сканирования пучка (отмечено стрелкой как  $\varphi_0$ ), демонстрирует свойство повышенной устойчивости к влиянию многократного рассеяния на ядрах атомов, участвующих в тепловом движении, и управляется атомными плоскостями кристалла.

Все перечисленные особенности движения каналированных частиц не укладывались в рамки модели статистического равновесия Линдхарда с его концепцией случайного расположения атомных цепочек и стимулировали исследования эффектов их упорядоченного расположения.

Вместе с тем отметим, что применение приближения БСАК при компьютерном моделировании двумерных угловых распределений каналированных частиц требовало значительных затрат машинного времени, особенно при учете теплового движения атомов кристалла, которое оказалось, как следует из приведенных примеров, важным для основных характеристик каналирования. Метод сопряженных блужданий Барретта, примененный для исследования деканалирования ионов [23], учитывал зависимость от температуры лишь для вероятности обратного рассеяния, а движение потока каналированных ионов в кристалле рассматривалось без учета теплового движения его атомов (0 К). При использовании численных методов интегрирования уравнений движения ионов в кристалле (метод Гаррисона, другие модификации метода конечных разностей) [26, 56] возникает такая же проблема учета теплового движения.

От этого недостатка свободно приближение, связанное с использованием при моделировании рассеивающего центра нового типа — атомной цепочки кристалла и непрерывного потенциала Линдхарда, который доказал свою состоятельность в широком диапазоне поперечных энергий частицы и температур кристалла.

#### 4. МОДЕЛЬ КРИСТАЛЛА АТОМНЫХ ЦЕПОЧЕК

Рассмотрение движения каналированных частиц в модельном кристалле, составленном из непрерывных цепочек Линдхарда вместо рядов атомов (далее «кристалл цепочек»), требует введения суммарного непрерывного поперечного потенциала

$$U_t(r) = \sum_n U_1(|\mathbf{r} - \mathbf{r}_n|), \quad (9)$$

где  $\mathbf{r}$ ,  $\mathbf{r}_n$  характеризуют положение частицы и АЦ в поперечной плоскости относительно оси канала  $z$ , а суммирование проводится по всем атомным цепочкам кристалла.

Решение двумерного нелинейного уравнения движения частицы в двумерном «кристалле», т. е. в поле периодического потенциала поперечной плоскости,



$$\frac{d^2 \mathbf{r}}{dt^2} = -\frac{1}{E} \nabla U_t(\mathbf{r}) \quad (10)$$

представляет собой сложную и в общем случае еще не решенную задачу. Вместе с тем карты такого потенциала для различных кристаллов достаточно широко представлены в литературе и для исследуемых направлений приведены в [34], где рассмотрены эффекты «кристалла АЦ» для легких релятивистских частиц.

Анализ структуры потенциала показывает, что в зависимости от поперечной энергии иона могут реализоваться два типа движения. При малой поперечной энергии (положительно заряженный) ион совершает финитное движение в потенциальной яме, образованной атомными цепочками — ближайшими соседями по решетке (режим сверхканалирования), численный расчет для которого с использованием метода конечных разностей проведен в [56]. Для иона с немалой поперечной энергией, превышающей предел сверхканалирования  $\varepsilon_{\perp}^*$  (типичные значения  $\varepsilon_{\perp}^* \sim 0,02$ , тогда как критическая энергия каналирования  $\varepsilon_{\perp c} = 2$ ), частицы совершают инфинитное движение, переходя из одной элементарной ячейки «кристалла» в другую. Для последнего случая, который далее и будет предметом обсуждения, хорошим приближением для примитивной элементарной ячейки решетки АЦ (например, для осевых каналов  $\langle 100 \rangle$ ,  $\langle 111 \rangle$  кристаллов со структурой алмаза, ГЦК и др.) и для ионов с поперечной энергией, значительно превышающей границы сверхканалирования (т. е. для  $\varepsilon_{\perp} \geq 0,1$ ), является следующая аппроксимация потенциала в пределах каждой элементарной ячейки:

$$U_t = \begin{cases} U_1(|\mathbf{r} - \mathbf{r}_n|), & |\mathbf{r} - \mathbf{r}_n| < r_c \cong r_0, \\ U_0 = \text{const}, & |\mathbf{r} - \mathbf{r}_n| \geq r_c. \end{cases} \quad (11)$$

Переход к потенциалу (11) дает для представительного набора типов осевых каналов возможность использовать приближение бинарных столкновений частицы с атомными цепочками (БСАЦ) [32, 33, 35, 37] при моделировании на компьютере движения в рассматриваемом типе «кристалла». Для реализации такого способа моделирования использовалось решение полной задачи о движении частицы в поле одной АЦ на основе модифицированной модели Линдхарда и метода усреднения по траектории [39, 40].

Программа моделирования движения частицы в двумерном кристалле АЦ по своей структуре близка к программе движения частицы в трехмерном атомном кристалле для приближения БСАК. На границе кристалла пучок частиц с заданной геометрией падения (полярный угол  $\theta_0$  по отношению к выбранной кристаллографической оси, азимутальный угол  $\varphi_0$  между плоскостью сканирования пучка и ближайшей атомной плоскостью, содержащей исследуемое осевое направление) претерпевал поверхностное преломление:

у каждой частицы появлялась поперечная энергия

$$\varepsilon_{\perp} = 2\theta_0^2/\theta_L^2 + U_t(\mathbf{r}_{\text{in}}), \quad (12)$$

где  $\mathbf{r}_{\text{in}}$  — случайная координата точки влета в кристалл, а потенциал  $U_t$  (11) выражен в безразмерной форме. Первое, «укороченное» рассеяние атомной цепочкой в зависимости от  $\varepsilon_{\perp}$  и значения момента импульса прослеживается от  $\mathbf{r}_{\text{in}}$  до  $r_c$ , после чего определяются новые значения  $\theta$ ,  $\varphi$  на выходе из области взаимодействия с одной цепочкой, т. е. на окружности с радиусом  $r_c$ . По рассчитанному в соответствии с симметрией решетки прицельному параметру очередного столкновения частицы с АЦ и значению поперечной энергии рассчитывается (азимутальный) угол рассеяния и переносная длина траектории в поле АЦ, а также другие характеристики частицы (электронные потери энергии, среднеквадратичный (полярный) угол многократного рассеяния ядрами атомов, участвующих в тепловом движении, и электронами, вероятность рассеяния на большой угол) в соответствии с [39].

Такая программа проходила апробацию при сравнении с результатами моделирования, полученными при использовании приближения БСАК для относительно тонкого кристалла как в геометрии на прохождение, так и по выходу обратного рассеяния в части его поверхностных осцилляций [23], и показала приемлемую точность (см. рис. 6). Поскольку все величины, характеризующие частицу, рассчитывались аналитически, а шаг по глубине  $z$  — длина рассеяния частицы одной цепочкой  $\Delta z$  — увеличивался пропорционально скорости иона и значительно превышал период кристалла ( $\Delta z/d \gg 1$ ) [39], скорость вычислений значительно повысилась (при рассматриваемых энергиях протонов  $\sim 1$  МэВ примерно в 10 раз) по сравнению с программами на основе приближения БСАК.

На первом этапе изменение полной энергии частицы не учитывалось и предполагалось, что движение частицы после прохождения границы кристалла происходит с сохранением поперечной энергии. При проведении расчета движения частиц в достаточно толстом слое проводился анализ реализованной совокупности прицельных параметров столкновений частиц с АЦ и по ней — восстановление диффузионной функции и других характеристик транспорта каналированных частиц на основе зависимостей потерь энергии и многократного рассеяния [39].

На втором этапе исследований в рассмотрение включались неупругие факторы рассеяния каждой АЦ. Рассчитанные в зависимости от поперечной энергии и прицельного параметра иона средние по столкновению значения квадратов углов многократного рассеяния на электронах и ядрах колеблющихся атомов использовались в качестве дисперсий гауссовского распределения для моделирования случайных реализаций соответствующих величин. Дополнительно рассматривалась величина случайного пространствен-

ного смещения в поперечной плоскости относительно траектории в непрерывном потенциале АЦ с дисперсией, определяемой средней переносной длиной  $\Delta z(\varepsilon_{\perp}, b_{\perp})$  и средним углом многократного рассеяния в соответствии с формулой Ферми (см., например, [13]). Высокая скорость расчетов позволила рассмотреть толщины кристалла, соизмеримые с величиной нормального пробега, и обеспечить необходимый уровень статистики для получения достоверных результатов.

## 5. ЭФФЕКТЫ КРИСТАЛЛА ЦЕПОЧЕК

**5.1. Режимы каналирования.** Проведены расчеты автокорреляционной импульсной функции (АКИФ) в пространстве импульсов поперечного относительно оси цепочки движения

$$\xi(z) = \langle \mathbf{p}_{\perp}(0) \mathbf{p}_{\perp}(z) \rangle_z = \langle \cos \varphi \rangle_z, \quad (13)$$

где скалярное произведение ортов поперечных импульсов ионов начального распределения  $\mathbf{p}_{\perp}(0)$  и распределения  $\mathbf{p}_{\perp}(z)$  на глубине  $z$  усредняется по угловому распределению на глубине  $z$  (обозначено  $\langle \dots \rangle_z$ ). Для модели статистического равновесия АКИФ имеет вид [6]  $\xi(z) = \exp(-z/\lambda_1)$ , где  $\lambda_1$  — так называемая длина наступления статистического равновесия, и на глубине

$$z > \lambda_1 = (8\varepsilon_{\perp})^{0,5} r_0^2 / (\pi \theta_L a_{TF}) \quad (14)$$

поперечные импульсы  $\mathbf{p}_{\perp}$  равномерно заполняют «кольцо»  $\theta^2 = \text{const}$ , т. е.  $\langle \mathbf{p}_{\perp} \rangle_{\varphi} \rightarrow 0$ .

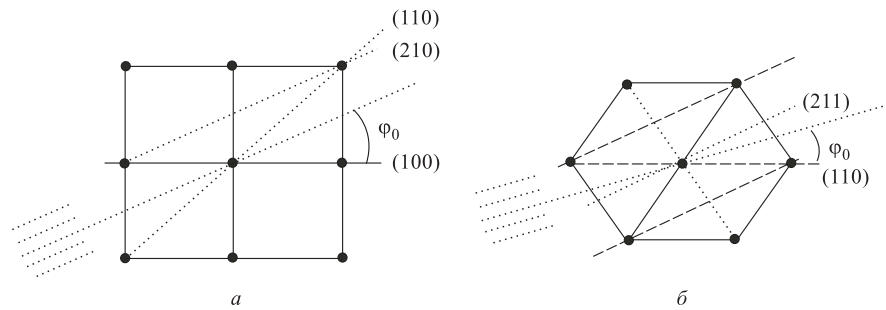


Рис. 10. Фрагменты стереографической проекции кристалла золота (ГЦК-структура) в окрестности кристаллографических осей:  $\langle 100 \rangle$  (а) и  $\langle 111 \rangle$  (б)

Результаты вычислений, полученные для кристалла АЦ на глубинах, значительно превышающих длину установления статистического равновесия

Линдхарда, в широком диапазоне полярных углов падения на кристалл относительно выбранной оси, показали зависимость АКИФ от положения плоскости сканирования пучка (начального азимутального угла  $\varphi_0$  на поверхности кристалла), как это ранее было получено для трехмерного кристалла (рис. 8), т. е. зависимость от  $\Delta\varphi = \chi = |\varphi_0 - \varphi_{hkl}|$ , где  $\varphi_{hkl}$  — положение атомной плоскости с (низкими) индексами Миллера ( $hkl$ ) на стереографической проекции кристалла в окрестности исследуемого кристаллографического направления. Примеры стереографических проекций для исследуемых далее кристаллов приведены на рис. 10. В большом угловом интервале ( $\Delta\varphi < 0,3$ ) наблюдается незатухающий характер АКИФ, пример расчета которой показан на рис. 11, что говорит о существовании режима регулярной динамики.

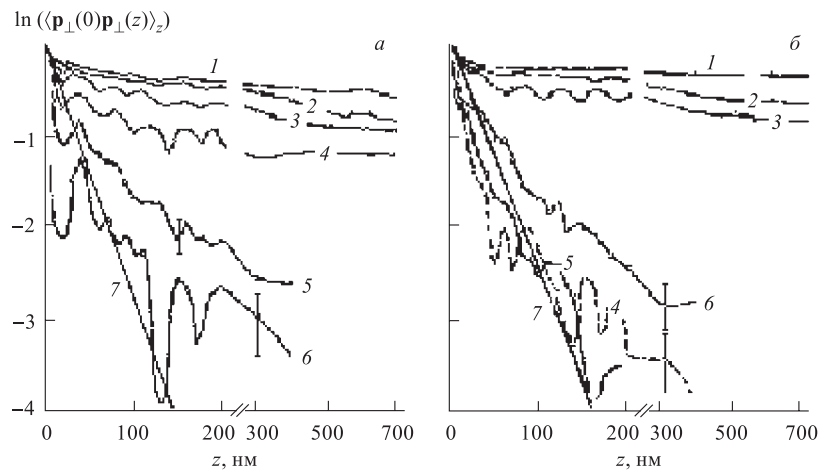


Рис. 11. Автокорреляционные импульсные функции  $\xi(z) = \ln \langle \mathbf{p}_\perp(0)\mathbf{p}_\perp(z) \rangle_z$  протонов с энергией 500 кэВ в осевом канале  $\langle 111 \rangle$  монокристалла золота в зависимости от толщины пройденного слоя  $z$  при различных значениях азимутального угла относительно атомной плоскости  $(110)$ :  $\chi = 0$  (1); 0,1 (2); 0,2 (3); 0,3 (4); 0,4 (5); 0,5 (6). АКИФ для модели статистического равновесия Линдхарда помечена цифрой 7. Поперечная энергия  $\varepsilon_{\perp 0} = 1$  (а); 2 (б). Кривая 6 (б) демонстрирует влияние слабой плоскости  $(211)$

Далее обозначенный режим регулярной динамики будем называть режимом «двойного каналирования» (ДК) [35], поскольку он реализуется в условиях одновременного управляющего действия осевой и плоскостной структур кристалла.

При превышении указанного выше диапазона начальных азимутальных углов АКИФ, как это наблюдается на рис. 11, быстро затухает с ростом глубины кристалла, но, в отличие от газа АЦ (кривая 7), присутствуют пульсации.

Далее такой режим, при котором наблюдается азимутальное перемешивание в системе упорядоченно расположенных АЦ, будем называть режимом «нормального каналирования» (НК).

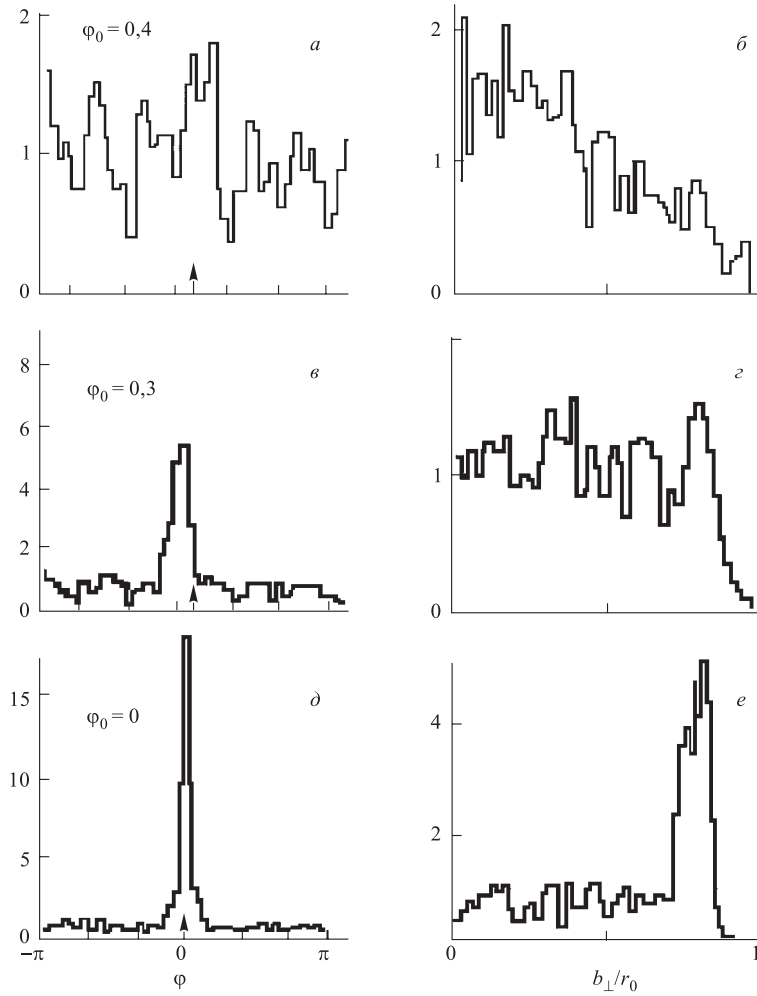


Рис. 12. Нормированные азимутальные распределения протонов, прошедших слой толщиной  $\sim 300$  нм в осевом канале  $\langle 100 \rangle$  монокристалла золота при начальном полярном угле  $\theta_0 = 0,7\theta_L$  и под разными начальными азимутальными углами  $\varphi_0 = 0$  (д), 0,3 (в) и 0,4 относительно плоскости (100) (а) (отмечены стрелками), а также накопленные в слое кристалла соответствующие им нормированные распределения прицельных параметров  $b_{\perp}$  столкновения с АЦ (б, г, е)

Указанные начальные условия для двух режимов приводили при реализации к радикальному различию характерных для осевого каналирования кольцеобразных угловых распределений частиц, прошедших одинаковый по толщине слой кристалла, развертка которых по азимутальному углу показана на рис. 12, *a, в, д*. В случае ДК ( $\varphi_0 = 0; 0,3$ ) основная масса частиц выходит в малом (по сравнению с  $\pi$ ) интервале азимутальных углов вблизи положения ближайшей по стереографической проекции атомной плоскости  $\varphi_{hkl}$  по отношению к плоскости сканирования пучка, а отношение максимум–фон в целом по распределению велико (приближается к 20), практически не меняясь с увеличением толщины пройденного слоя.

В случае НК (большие углы  $\varphi_0 = 0,4$ ) наблюдается быстрое размывание пика в угловом распределении вблизи угла падения  $\varphi_0$  с увеличением толщины пройденного слоя и установление стационарного азимутально-симметричного распределения с периодическими провалами интенсивности при углах выхода из кристалла, отвечающих положениям атомных плоскостей в соответствии с симметрией кристалла (азимутальные тени от атомной плоскости как цепочки АЦ). Число частиц в угловом распределении для углов, отличающихся на  $\pi$ , стремится к уравниванию. Отметим, что в предшествующем случае (малые углы  $\varphi_0$ , благоприятствующие режиму ДК) малый по интенсивности фон вне угловой области пика также имеет угловую модуляцию с периодом расположения атомных плоскостей. В совокупности эти два типа распределений дают картину, соответствующую ранее полученному распределению за тонким кристаллом, показанному на рис. 7.

Анализ накопленных распределений прицельных параметров столкновений частицы с АЦ (рис. 12, *б, г, е*) показал наличие резкого максимума в области больших прицельных параметров для режима ДК, т.е. для малых величин азимутального отклонения  $\Delta\varphi = \chi$  плоскости сканирования пучка от атомной плоскости. При усреднении по такому распределению темпов многократного рассеяния на ядрах колеблющихся атомов и потерь энергии при столкновении с АЦ это должно приводить к значительному уменьшению темпа изменения полной и поперечной энергий частицы по сравнению с моделью статистического равновесия, так как для нее характерно равновероятное распределение прицельных параметров [40].

Поскольку на поверхности кристалла при фиксированной геометрии падения потока (начальных углах  $\theta_0, \varphi_0$ ) остается случайной координата влета частицы относительно оси цепочки, существует начальный разброс прицельных параметров столкновений с АЦ и поперечных энергий частиц. Поэтому при любой геометрии падения пучка на кристалл существует возможность одновременного существования различных режимов движения частиц и возникает задача разделения режимов движения при моделировании транспорта ионов в кристалле АЦ.

Для выделения частиц в режиме регулярной динамики было использовано предположение о том, что их траектории локализируются вдали от осей АЦ, так что в последовательных столкновениях с АЦ реализуются большие прицельные параметры, обеспечивающие относительно малые углы азимутального рассеяния с определенным максимальным углом  $\varphi_{\max}$ , не превышающим углового расстояния между соседними по стереографической проекции атомными плоскостями.

Полученные результаты представлены для канала  $\langle 100 \rangle$  Au на рис. 13, где прослежена зависимость числа частиц в режиме двойного каналирования от поперечной энергии (полярного угла относительно исследуемого кристаллографического направления) и начальной азимутальной ориентации пучка относительно наиболее плотноупакованной плоскости, содержащей исследуемую ось. Они показывают, что при наиболее благоприятных условиях для ДК ( $\Delta\varphi = 0$ ) не все частицы движутся в этом режиме, а лишь до  $\sim 75\%$  упавшего потока, т. е. всегда есть примесь НК. С ростом  $\Delta\varphi$  доля частиц ДК уменьшается (соответственно увеличивается доля НК) и размывается максимум в распределении прицельных параметров (рис. 12, б, г, е), смещаясь от максимально возможных значений в сторону их уменьшения.

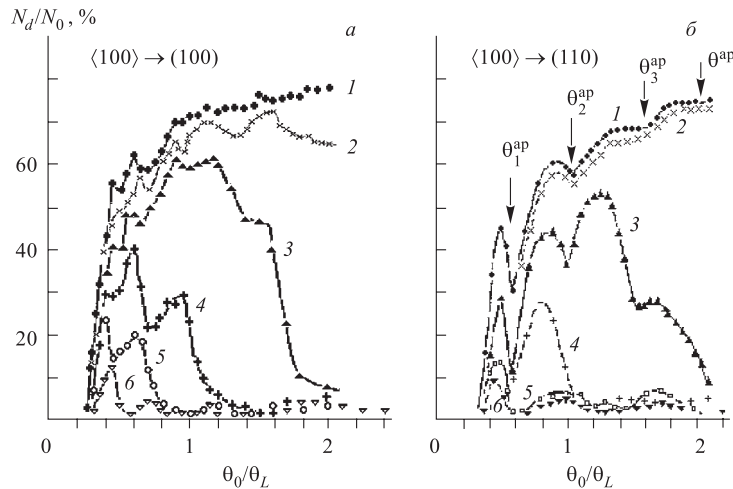


Рис. 13. Зависимость числа частиц в режиме двойного каналирования, отобранных в осевом канале  $\langle 100 \rangle$  кристалла золота, от начального значения полярного угла  $\theta_0$  импульса частиц с осью канала. Кривые отличаются значениями начального азимутального угла  $\varphi_0$  плоскости сканирования пучка на поверхности кристалла относительно плотноупакованной атомной плоскости (100): а) двойное каналирование вблизи атомной плоскости (100);  $\varphi_0 = 0^\circ$  (1);  $7^\circ$  (2);  $10^\circ$  (3);  $14^\circ$  (4);  $18^\circ$  (5);  $22,5^\circ$  (6); б) двойное каналирование вблизи атомной плоскости (110),  $\varphi_0 = 45^\circ$  (1);  $42,5^\circ$  (2);  $38^\circ$  (3);  $34,5^\circ$  (4);  $31^\circ$  (5);  $26,5^\circ$  (6)

Из рис. 13 виден следующий угловой диапазон существования режима двойного каналирования по полярному углу: в области малых углов он ограничен значением, хорошо коррелирующим с углом полуширины осевой тени, зависящим от температуры кристалла, — углом Барретта  $\theta_B(T)$  [23]; в области больших углов — углом существования собственно плоскостного каналирования  $\theta^{ap} \sim \theta_{LW}$ , полученного при исследовании перехода ось–плоскость при каналировании Ленкайтом и Веделем при рассмотрении атомной плоскости как совокупности атомных цепочек [57]. Обращает на себя внимание немонотонная зависимость числа частиц в двойном канале от полярного угла, связанная с наличием резонансного деканалирования, известного для случая выполнения условий наблюдения перехода ось–плоскость при каналировании  $\Delta\varphi = 0$  (кривая 1) [24], но еще более резко выраженная при отклонении от этого условия ( $\Delta\varphi \neq 0$ ).

Переходя к характеристикам НК, следует отметить, что для этого режима выявлено преобладание малых прицельных параметров столкновений с АЦ, как следует из рис. 12, б ( $\Delta\varphi = 0,4$ ), что означает возрастание скорости многократного рассеяния и потерь энергии по сравнению с прогнозами модели статистического равновесия [40].

Объяснение этому факту получено при исследовании истории рассеяния частиц НК, в которых как в регенерирующем стационарном случайном процессе в возобновляемых выборках из нескольких последовательных столкновений с АЦ обязательно присутствует рассеяние на большой азимутальный угол при реализации азимутальной тени от атомной цепочки, на существование которой обратил внимание Линдхард [6] при рассмотрении атомной плоскости кристалла как «цепочки цепочек». Для частиц НК, попавших на некоторой глубине в определенную часть кольцеобразного распределения, например, в малый диапазон углов вблизи минимума (максимума) плоскостной тени, предыстория представлена на рис. 14. В последовательно прослеженных вспять от (задней) поверхности кристалла азимутальных распределениях двигающихся вперед частиц наблюдаются эффекты фокусировки в пространстве азимутальных углов (т.е. поперечных импульсов частиц), похожие на угловые эффекты, зафиксированные Булгаковым и Шульгой [25] в условиях перехода ось–плоскость при каналировании при обсуждении резонансного деканалирования. Через некоторое число столкновений (не превышающее 10), отсчитанных назад, эти частицы равномерно заполняют все «фазовое пространство» (в данном одномерном случае диапазон азимутальных углов  $[0, 2\pi]$ ). Как это наблюдается при сравнении примеров рис. 14, а и б, на большой глубине распределения асимптотически не различаются для разных интервалов, выбранных для анализа в азимутальном распределении (вблизи минимума (а) или максимума (б) тени от плоскости). Это свойство соответствует требованию фазового размешивания, сформулированному Крыловым [58] в качестве необходимого условия для применения статистического опи-



сания. При всей условности приведенной иллюстрации (время отсчитывается в числе столкновений) она демонстрирует свойства глобальной неустойчивости по Ляпунову движения частиц в режиме НК, приводящие к феномену динамического хаоса, известному из нелинейной динамики [27, 28].

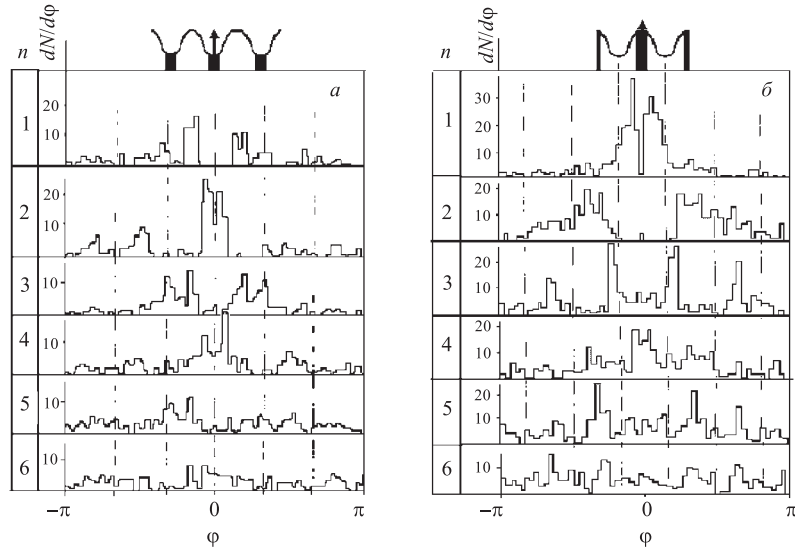


Рис. 14. Предыстория частиц, движущихся в режиме НК в осевом канале  $\langle 111 \rangle$  Au при  $\varepsilon_{\perp 0} = 1$  и вышедших в определенном азимутальном направлении на поверхности кристалла: азимутальные распределения этих частиц в кристалле на глубинах, соответствующие  $n$  ( $n = 1, 2, 3 \dots$ ) столкновениям с атомной цепочкой до выхода из кристалла. Показаны две группы частиц из азимутального распределения при  $\varphi_0 = 0, 4$ , вышедшие из кристалла *a*) вблизи минимума (вблизи направления атомных плоскостей  $\{110\}$ ); *б*) вблизи максимума. Вертикальные линии (пунктир) показывают положения атомных плоскостей  $\{110\}$

Таким образом, на некоторой глубине кристалла образуется стационарное самоподдерживающееся распределение потока НК, имеющее по азимуту кольцеобразное распределение и стационарное распределение прицельных параметров в слое кристалла с толщиной, соответствующей затуханию АКИФ. На этой основе были определены средние характеристики процессов многократного рассеяния, сопровождающих движение в режиме НК, которые должны заменить результаты модели Линдхарда при определении в зависимости от поперечной энергии значений диффузионной функции, коэффициента динамического трения и скорости потерь энергии в кинетическом уравнении. В качестве примера на рис. 15 и 16 приведен [37] средний темп изменения

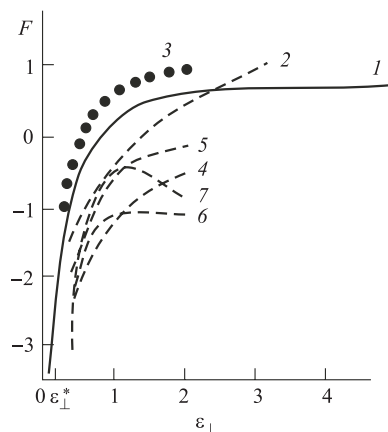


Рис. 15. Безразмерная скорость изменения среднего квадрата многократного рассеяния протонов на ядрах атомов, участвующих в тепловом движении,  $F = \frac{\langle \delta\Omega_n^2 / \delta z \rangle_{se}}{\varepsilon \pi N a_{TF}^2}$ , в зависимости от безразмерной поперечной энергии (ср. с рис. 1): 1 — модифицированная теория Линдхарда [39]; 2 — теория Линдхарда [6] (1, 2 — газ атомных цепочек); 3 — результаты расчета в кристалле АЦ для режима НК (динамического хаоса) в канале  $\langle 100 \rangle$  Au,  $E_p = 500$  кэВ,  $T = 300$  К; 4 — результаты расчета в кристалле АЦ для режима ДК: осевой канал  $\langle 100 \rangle$  при  $\varphi_0 = 0$  относительно атомной плоскости (100); 5 — то же, что и (4), но  $\varphi_0 = \varphi_c^{(100)}/2$ ; 6 — то же, что и (4), но  $\varphi_0 = 0$  относительно атомной плоскости (110); 7 — то же, что и (4), но  $\varphi_0 = \varphi_c^{(110)}/2$ . Азимутальные критические углы для ДК  $\varphi_c^{(100)}$ ,  $\varphi_c^{(110)}$  вычислялись по (15)

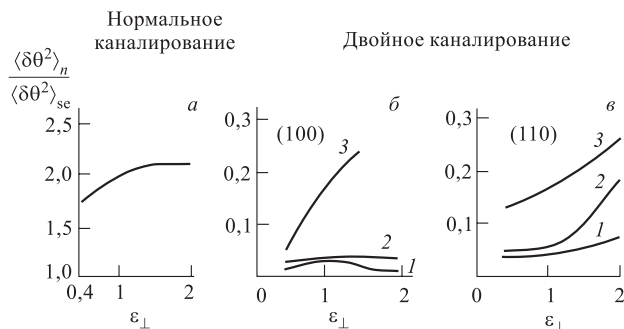


Рис. 16. Отношение темпов изменения средних квадратов углов многократного рассеяния протонов на ядрах атомов, участвующих в тепловом движении, по расчетам в модели кристалла АЦ  $\langle \delta\theta^2 \rangle_n$  и в модифицированной теории Линдхарда (модель газа АЦ)  $\langle \delta\theta^2 \rangle_{se}$ : для осевого канала  $\langle 100 \rangle$  Au в режиме нормального каналирования (а), в режиме двойного каналирования вблизи плоскостей  $\{100\}$  (б) и вблизи плоскостей  $\{110\}$  (в) при  $\chi = 0$  (1), 0,16 (2), 0,31 (3)

среднего квадрата угла многократного рассеяния протонов на ядрах атомов, участвующих в тепловом движении, для различных режимов в сравнении с расчетами в модели Линдхарда [6], а также в рамках ее модификации [39]. В качестве важного результата отметим возрастание в два раза темпа многократного ядерного рассеяния частиц в режиме НК по сравнению со средой газа АЦ и одновременно резкое его уменьшение для частиц, двигающихся в режиме ДК. Это нашло отражение в реализации аномально высокого значения темпа ядерного рассеяния [50] по сравнению с рис. 2, где учтен вклад тепловых корреляций в смещениях соседних атомов по АЦ, превышающий в два раза уровень ядерного рассеяния для случайного движения в широкой угловой области.

**5.2. Свойства режима двойного каналирования.** Определение угловой области существования режима ДК оказалось сложной задачей в связи с присутствием нелинейных резонансов, которые приводят к заметному уменьшению заселения режима. Впервые существование резонансов в движении каналированных частиц было открыто экспериментально и при компьютерном моделировании Булгаковым и Шульгой в геометрии перехода от осевого к плоскостному каналированию («ось-плоскостного перехода» — ОПП) как резкое уменьшение прозрачности кристалла (числа прошедших частиц) при определенных углах падения ионов [25–27]. Во введенных выше обозначениях это соответствует повороту кристалла от геометрии  $\chi_{\min}$  ( $\theta_0 = 0$ ) с увеличением полярного угла  $\theta_0$  падения потока относительно оси кристалла при точном выполнении условия  $\chi = \Delta\varphi = 0$ . Проведенные исследования показали, что эффекты при ОПП являются частным случаем более общего явления — существования режима ДК ( $\Delta\varphi \neq 0$ ), причем нелинейные резонансы для этого режима существуют и выражены более сильно. Так, заселенность режима двойного каналирования в области его существования ( $\sim 0,2 < \theta_0/\theta_L < \sim \theta_{LW}$ ) на рис. 13 в зависимости от поперечной энергии носит немонотонный характер. Эта иллюстрация вместе с характеристиками, представленными на рис. 12, показывает отличие ДК от режима плоскостного каналирования.

Вне областей резонанса можно ввести аналитическую оценку «критического» азимутального угла  $\Delta\varphi^{\text{cr}}$  в области существования режима ДК в зависимости от поперечной энергии в осевом канале:

$$\Delta\varphi^{\text{cr}} = k\Phi_{\min}(\varepsilon_{\perp}), \quad k \sim 0,7. \quad (15)$$

Азимутальный угол  $\Phi_{\min}$  раствора тени от атомной цепочки получен Линдхардом [6] при анализе атомной плоскости как «цепочки атомных цепочек» в виде

$$\Phi_{\min} = 1,5\{(3\pi a_{\text{TF}})/(\varepsilon_{\perp} d_s)\}^{1/3}, \quad (16)$$

где  $d_s$  — расстояние между соседними АЦ в атомной плоскости. Полученные при моделировании критические углы существования режима ДК суще-

ственно зависят от типа расположения атомных цепочек в рассматриваемой атомной плоскости, что иллюстрируется примером, приведенным на рис. 17. Резонансные особенности при движении в осевом канале  $\langle 100 \rangle$  наиболее отчетливо выражены для атомных плоскостей  $\{110\}$ , характеризующихся смещением АЦ для соседних плоскостей, как это показано на рис. 17, б. При приближении к положению резонанса (по полярному углу) азимутальная область захвата в режим ДК изменяется, точками на рис. 17 показаны максимальные азимутальные углы рассеяния, но аналитическое описание этого двумерного нелинейного явления отсутствует. Отметим, что для частного случая одномерного рассмотрения резонансов в геометрии ОПП задача сводится к исследованию устойчивости решения уравнения типа Матье [59].

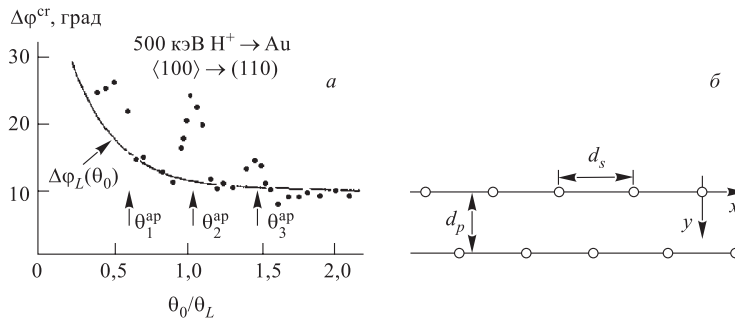


Рис. 17. Критический угол двойного каналирования как максимальный угол наблюдения ДК по результатам компьютерного моделирования (точки) и расчет по (15) (непрерывная кривая) для протонов с энергией 500 кэВ в осевом канале  $\langle 100 \rangle$  Au в окрестности атомной плоскости (110) в зависимости от начального полярного угла движения относительно направления оси  $\langle 100 \rangle$ . Стрелками отмечены углы, при которых наблюдаются минимумы в заселении режима двойного каналирования (а). Показана также схема расположения атомных цепочек для плоскостей (110) с периодом  $d_s$  (б). Масштаб вдоль оси  $x$  на рис. 17, б в расположении атомных цепочек в атомной плоскости не выдержан

Для атомных плоскостей  $\{100\}$  без смещения атомных цепочек в соседних плоскостях резонансные неустойчивости выражены слабее, и выражение (15) удовлетворительно описывает результаты моделирования.

Выявленные по результатам моделирования на ЭВМ углы резонансного деканалирования  $\theta_1^{ap}, \theta_2^{ap}$  (рис. 13) в случае геометрии ОПП ( $\Delta\varphi = 0$ ) достаточно точно воспроизводят аналитический расчет Ленкайта–Веделя, проведенный методом Боголюбова–Митропольского при учете возмущений одномерного потенциала плоскостного канала, связанных с первыми членами фурье-разложения непрерывного потенциала атомной плоскости как цепочки атомных цепочек [57].

Для сравнения с теорией Линдхарда в качестве оценочной характеристики изменения поперечной энергии вследствие многократного рассеяния при движении по регулярной траектории в режиме ДК произведено вычисление скорости изменения среднего квадрата полярного угла из-за ядерного рассеяния. Были использованы накопленные распределения прицельных параметров в достаточно толстом слое и метод усреднения вдоль траектории [39]. В зависимости от азимутального положения плоскости сканирования пучка полученные значения (рис. 15, 16) в два-три раза меньше, чем в модели статистического равновесия.

Аналогичный вывод можно сделать и об уменьшении в режиме ДК скорости электронного торможения, но количественно выражение определяется плохо формализуемой величиной  $\alpha$ , введенной Бором и Линдхардом [6] для разделения одночастичных и коллективных возбуждений при рассеянии ионов в электронном газе кристалла (формула (31) в [39]). Расчеты, проведенные для обработки эксперимента с очень тонким кристаллом ( $\langle 100 \rangle$  Au, 40 нм) для выяснения азимутальной зависимости  $\Delta E(\chi)$  в геометрии на прохождение [60] и показавшие ее существование, при значении  $\alpha = 1/2$ , как это широко применяется в расчетах деканализирования, дали достаточно значимые расхождения с экспериментальными данными. Исследования диэлектрической функции металла при расчете потерь энергии протонов относительно низких энергий (в области максимума энергетических потерь) с учетом вклада электронов атомных остовов показали, что это значение существенно ниже [61, 62], что устранило отмеченные выше разногласия. Более того, такого рода эксперименты могут служить способом достаточно точного определения величины  $\alpha$  для других кристаллов при варьировании энергии (и типа) частиц.

**5.3. Сечения Пуанкаре.** Для исследования структуры фазового пространства кристалла цепочек использовался метод сечений Пуанкаре [27], впервые примененный для исследования потока каналированных частиц Ходыревым [33]. Для визуализации случаев НК и ДК использовалась его программа. Примеры сечений Пуанкаре приведены на рис. 18. Фазовые точки, соответствующие моментам пересечения границы элементарной ячейки двумерного «кристалла», в случае НК беспорядочно распределены по доступной области фазового пространства, демонстрируя картину динамического хаоса. В случае ДК в пределах областей регулярной динамики фазовые точки укладываются на замкнутые кривые правильной формы, образующие концентрическое семейство, что свидетельствует [27, 28] о квазипериодическом регулярном характере движения частиц в этом режиме и наличии дополнительных к поперечной энергии адиабатических инвариантов движения частиц. Это по-новому может прояснить немонотонный характер заселения режима ДК, отмеченный выше (рис. 13).

Нелинейные резонансы присутствуют в виде характерных островов, занимающих промежуточное место между областью динамического хаоса и

областью квазипериодических регулярных траекторий. Из анализа сечений Пуанкаре следует, что переход в резонанс сопровождается уменьшением области регулярного движения, как это наблюдается на рис. 19. Это однозначно свидетельствует о том, что при азимутальном угле, отсчитываемом от атомной плоскости, подчиняющемся условию  $\varphi < \Delta\varphi^{\text{cr}}$ , резонансным углам соответствуют минимумы захвата в режим ДК. Полученный результат подтверждает модели «резонансного деканализирования» при ОПП [25–27, 59].

Для объяснения резонансных эффектов выдвигалась также модель «резонансного каналирования» [63], по которой при резонансных углах происходит захват в режим, управляемый плоскостью. Анализ сечений Пуанкаре показал, что этому случаю соответствует захват на резонансные острова с относительно малой мерой для резонансных полярных углов в области относительно больших значений поперечной энергии частицы при выполнении условия  $\varphi_0 > \Delta\varphi^{\text{cr}}$ , т. е. в угловых окрестностях вблизи атомных плоскостей с более высокими индексами Миллера.

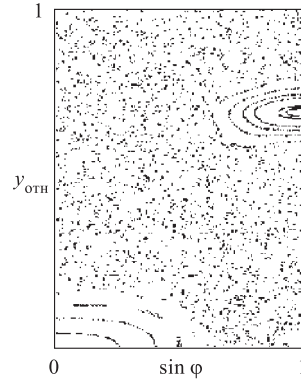


Рис. 18. Сечение Пуанкаре для фазового пространства поперечного движения протонов в канале  $\langle 100 \rangle$  в безразмерных переменных — координата  $y_{\text{отн}} = y/(d_s/2)$  и импульс  $p_y/|p_{\perp}| = \sin \varphi$  при  $\varepsilon_{\perp} = 1,6$

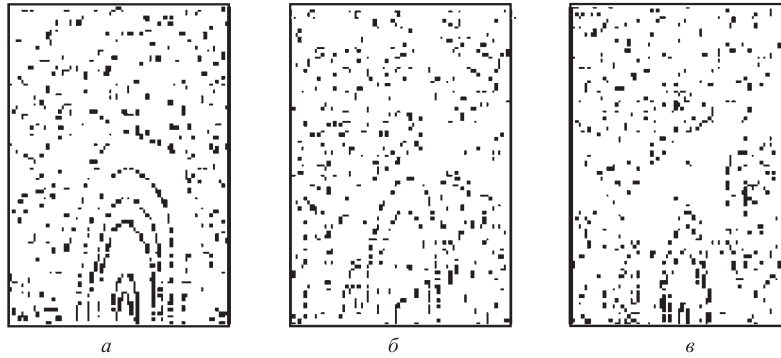


Рис. 19. Фрагменты сечения Пуанкаре, соответствующие регулярному движению в режиме двойного каналирования вблизи плоскости (110) при поперечных энергиях  $\varepsilon_{\perp} = 1,6$  (а); 1,8 (б); 2,0 (в). Вариант в соответствует условиям резонансного деканализирования

**5.4. Обратное рассеяние.** Резонансные явления при движении в режиме ДК могут проявляться как в экспериментах по прохождению каналированного потока через тонкий кристалл, так и в геометрии обратного рассеяния. С помощью расчетов в подходе БСАЦ построена двумерная карта выхода обратного рассеяния в окрестности кристаллографической оси (направления  $\langle 100 \rangle$ ,  $\langle 111 \rangle$ ) золота.

Увеличенная скорость счета на ЭВМ с использованием разработанного программного обеспечения позволила накопить высокую статистику выхода рассеянного назад потока, выявившую сложную топографию наложения осевых и плоскостных кристаллических эффектов в окрестности оси  $\langle 100 \rangle$  (рис. 20), и дать более подробную картину, чем это было рассчитано ранее [64]. На врезке рис. 20 показаны сечения карты выхода обратного рассеяния под разными азимутальными углами по отношению к атомной плоскости (110).

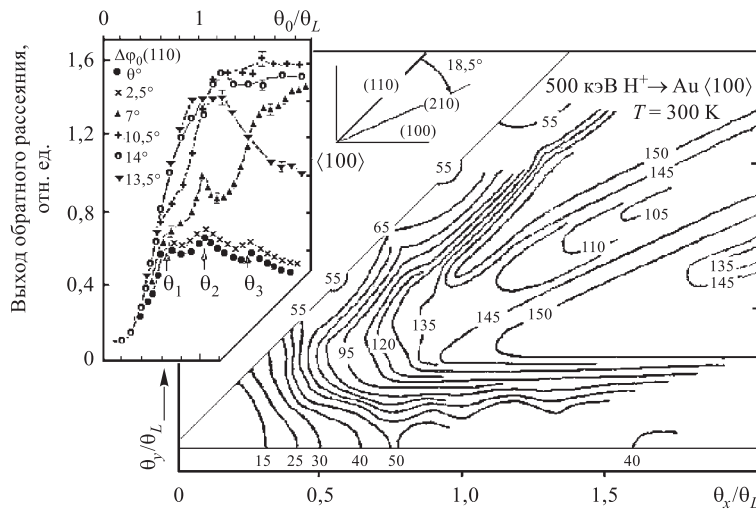


Рис. 20. Двумерная карта выхода обратного рассеяния протонов с энергией 500 кэВ в окрестности оси  $\langle 100 \rangle$  кристалла золота при температуре 300 К. На врезках показаны схема стереографической проекции и сечения карты при определенных угловых расстояниях  $\Delta\varphi$  от атомной плоскости (110); стрелками указаны положения полярных углов резонансного деканалирования

Одновременно рассчитывался поток в прямом направлении в кристалле и выделялась фракция двойного каналирования, показанная ранее на рис. 13 (двойное каналирование  $\langle 100 \rangle \rightarrow \langle 110 \rangle$ ). Из сравнения рис. 13 и 20 следует высокая степень дополнительности заселения прямого потока в режиме ДК,

практически не дающего вклада в обратное рассеяние, и потока обратно рассеянных частиц в режиме НК. При этом резонансное деканализирование в окрестности резонансных углов проявляется в виде уменьшения заселенности в режиме ДК при движении вперед (появляется провал в гладкой зависимости от полярного угла), что соответствует локальному увеличению фракции нормального каналирования и (или) заселения промежуточных состояний («островов» на сечении Пуанкаре) и в результате приводит к увеличению выхода обратного рассеяния — в виде четко выраженного локального дополнительного максимума. Все это происходит на фоне общего уменьшения выхода обратного рассеяния в области существования двойного каналирования — в области азимутальных углов  $\Delta\varphi < \Delta\varphi^{cr}$  вблизи атомной плоскости, как об этом мы уже говорили выше. Отметим, что при  $\Delta\varphi \neq 0$ , т. е. когда плоскость сканирования пучка не совпадает с атомной плоскостью, отмеченные эффекты выражены сильнее, чем в геометрии ОПП ( $\Delta\varphi = 0$ ).

Таким образом, проясняется взаимодействие двух режимов каналирования, дающее объяснение азимутальной структуры осевой тени.

## 6. ВЛИЯНИЕ ПРОЦЕССОВ МНОГОКРАТНОГО РАССЕЯНИЯ

В этом разделе и далее при моделировании учитывались эффекты неупругого рассеяния ионов электронами и ядрами атомов кристалла, участвующих в тепловом движении при заданной температуре. Необходимая модификация программ моделирования, соответствующая этому случаю, описана выше.

Приведем данные по влиянию теплового движения атомов кристалла на выявленные типы движения частиц в осевом канале на примере монокристалла золота при низкой и комнатной температурах. В области резонансных углов чувствительность к уровню тепловых колебаний решетки аномально высокая. Поэтому для наблюдения резонансных особенностей методом обратного рассеяния рекомендуется или проводить эксперимент при низкой температуре, или использовать кристалл с малыми среднеквадратичными тепловыми смещениями при комнатной температуре, например, вольфрам. С другой стороны, из-за большого удаления траекторий частиц в режиме ДК от оси АЦ возмущающее влияние теплового движения в кристалле на характер движения в этом режиме слабое.

На рис. 21 приведены характеристики заселения режима ДК при учете многократного рассеяния протонов в осевом канале  $\langle 100 \rangle$  Au при температурах 48 и 300 К. Отбор частиц проводился вблизи задней поверхности кристалла на толщине слоя, превышающей значение длины затухания АКИФ для нормального каналирования. При низкой температуре (48 К), по существу, вводящей эффект нулевых колебаний атомов кристалла, зависимость от полярного угла (от поперечной энергии частиц) числа захваченных частиц со-



ответствует угловой зависимости критического угла ДК (15) ( $\sim \theta^{-2/3}$ ). При повышении температуры зависимость в области больших углов становится более резкой. Сравнение двух кривых позволяет сделать вывод об *увеличении* числа частиц в этом режиме при увеличении температуры, т. е. определенная и заметная часть из режима НК захватывается в объеме кристалла в режим ДК из-за влияния теплового движения атомов кристалла.

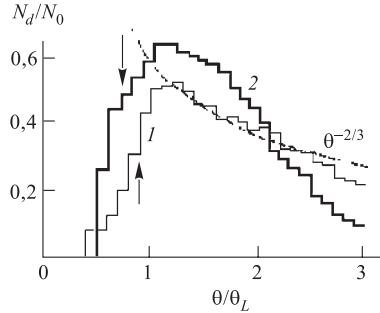


Рис. 21. Угловая зависимость числа частиц в режиме двойного каналирования  $\langle 111 \rangle \rightarrow \langle 110 \rangle$  для протонов с энергией 500 кэВ в кристалле Au толщиной 450 нм при температурах 48 К (1) и 300 К (2). Стрелками показаны зависящие от температуры углы Барретта

Распределение потерь энергии для частиц в режиме нормального каналирования, которые на заданной глубине кристалла в силу своих относительно высоких значений определяют энергетические спектры каналированных частиц в целом, представлено на рис. 22. Показана ориентационная зависимость функции, представляющей относительные потери энергии для режима нормального каналирования [37] в канале  $\langle 111 \rangle$  Au протонов с энергией 0,5 МэВ после прохождения слоя толщиной 0,16 мкм в области суще-

ствования режима ДК, по результатам расчетов в модели кристалла АЦ. Кривые получены: 1 — с учетом упорядоченного расположения АЦ, но без учета многократного рассеяния; 2 — с учетом упорядоченного расположения АЦ и многократного рассеяния на электронах; 3 — с учетом упорядоченного расположения АЦ и многократного рассеяния на электронах и ядрах атомов кристалла, участвующих в тепловом движении при температуре 48 К; 4 — результаты имитации модели статистического равновесия Линдхарда. Отмечены углы резонансного деканалирования, полученные при расчетах методом Монте-Карло. Необходимо обратить внимание на существенное превышение этой функцией единичного уровня в широком диапазоне безразмерной поперечной энергии  $\varepsilon_{\perp}$  с границей, далеко выходящей за значение  $\varepsilon_{\perp B}$ , и дальнейшее ее медленное приближение к единице даже при низкой температуре кристалла, при которой произведен расчет. При повышении температуры кристалла следует ожидать дальнейшего их увеличения в соответствии с выражением (31) модифицированной [39] теории Линдхарда. Отметим также «резонансный» характер максимальных передач энергии в режиме нормального каналирования, определяемый неустойчивостями движения в режиме двойного каналирования [35] и принципиально не осуществимый в аморфном теле.

Анализ, представленный на рис. 22, показал определяющую роль в увеличении темпа потерь энергии по сравнению с результатами модели статистического равновесия как эффектов упорядоченности АЦ, так и теплового движения атомов кристалла, причем последнее свойство и приводит к появлению аномалий при резонансных углах. Экспериментально такие аномалии в потерях энергии наблюдались при резонансных углах в условиях ОПП для протонов в кремнии (см., например, [51, 65, 25]).

Таким образом, существование промежуточных областей в фазовом пространстве между режимами регулярной динамики и динамического хаоса, выявленное при расчете сечений Пуанкаре в условиях потенциального движения в непрерывном потенциале кристалла, с их, как показывают проведенные выше расчеты выхода обратного рассеяния, повышенной скоростью рассеяния, становится важной особенностью движения в режиме нормального каналирования при включении в рассмотрение процессов многократного рассеяния.

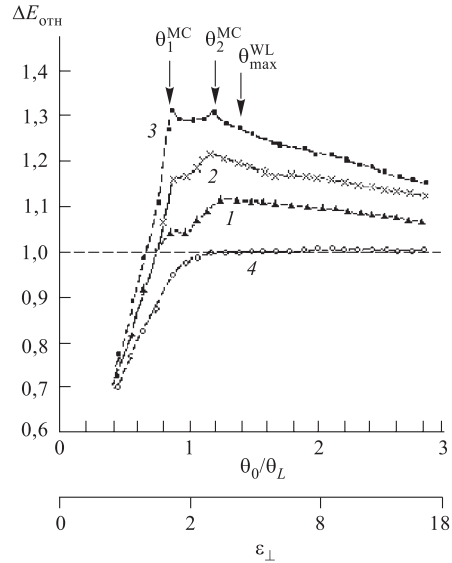


Рис. 22. Ориентационная зависимость относительных потерь энергии для режима НК (динамического хаоса) в канале  $\langle 111 \rangle$  Au протонов с энергией 0,5 МэВ после прохождения слоя толщиной 0,16 мкм по результатам расчетов в модели кристалла АЦ

## 7. ЭВОЛЮЦИЯ ПОТОКА ЧАСТИЦ В КРИСТАЛЛАХ НА БОЛЬШИХ ГЛУБИНАХ

Высокая скорость счета программ МК БСАЦ позволила провести моделирование прохождения пучка с различной геометрией падения через слои кристалла с толщиной, превышающей нормальный пробег, и обеспечить высокую статистику ( $\sim 10^4$ ) в угловых двумерных распределениях при заданных глубинах. Предметом исследования являлись «канализованные звезды», известные из ранних экспериментов [66] по прохождению канализованных ионов через «толстые» кристаллы. Сходная картина наблюдается при исследованиях каналирования релятивистских пучков адронов в кристаллах полупроводников с решеткой типа алмаза [70]. В связи с отсутствием теоретических или рас-

четных средств описания транспорта частиц в толстом кристалле до сих пор они не получили своего рассмотрения.

Множество численных экспериментов по описанию транспорта протонов в режиме осевого каналирования ( $\varepsilon_{\perp 0} \sim 0$ ), случайного движения ( $\varepsilon_{\perp 0} \sim 10$ ), двойного и нормального каналирования и каналирования в плоскостном канале позволило выявить следующие закономерности (примеры полученных распределений с энергиями 1,5 МэВ вблизи направления  $\langle 100 \rangle$  Au при температурах 48, 300 и 1200 К в диапазоне глубин до 10 мкм (нормальный пробег  $R_p = 9,8$  мкм [70]), с энергией 1 МэВ в окрестности направления  $\langle 111 \rangle$  Au до 9 мкм ( $R_p = 5,5$  мкм [70]) и 2 МэВ в направлениях  $\langle 111 \rangle$  W в диапазоне до 20 мкм ( $\sim 1,4R_p$  [70]) приведены на рис. 23–25).

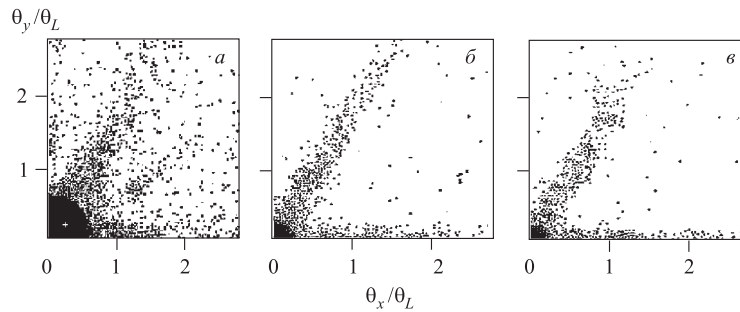


Рис. 23. Фрагменты двумерных угловых распределений протонов с начальной энергией 1 МэВ в монокристалле золота при температуре 300 К с направлением падения, характеризуемым полярным углом  $\theta_0 = 0,32\theta_L$  к кристаллографической оси  $\langle 111 \rangle$  и начальным азимутальным углом  $\varphi_0 = 20^\circ$  к атомной плоскости  $\{110\}$  (отмечено знаком + на *a*), на различных глубинах от поверхности (мкм): 0,5 (*a*), 5 (*б*) и 9 (*в*). Нормальный проецированный пробег 5,5 мкм [70]. Начало координат — направление оси  $\langle 111 \rangle$ . Плоскости  $\{110\}$  расположены под углами 0 и  $60^\circ$  к оси абсцисс, плоскости  $\{211\}$  — под углами 30 и  $90^\circ$ . Статистика — 6000 частиц

На относительно малых глубинах  $\sim 0,1$  мкм при падении пучка вне областей ДК в диапазоне полярных углов  $(0,5 \div 2,5)\theta_L$  происходит интенсивное азимутальное рассеяние частиц атомными цепочками (которое значительно эффективнее «обычного» атомного рассеяния по полярному углу) и связанное с ним угловое перемешивание (установление стационарного кольцеобразного распределения). Далее в объеме кристалла с увеличением толщины ядерное рассеяние и тепловые колебания решетки наряду с деканализированием обеспечивают захват (в частности, деканализированных из осевого канала частиц) в разрешенные области существования режима ДК сразу для всех плотноупакованных атомных плоскостей, причем этот процесс тем интенсивнее, чем выше

температура. Этот сценарий наиболее четко выражен при немалых начальных поперечных энергиях ( $\varepsilon_{\perp} \geq 1$ ).

В геометрии падения вдоль кристаллографической оси (геометрии  $\chi_{\min}$  при осевом каналировании с ограничением в расчетах  $\varepsilon_{\perp} \geq \varepsilon_{\perp}^*$ ), когда появление режима ДК в приповерхностных слоях затруднено, на малых глубинах в двумерном угловом распределении в районе атомных плоскостей развиваются первоначально четкие плоскостные азимутальные тени как локальные минимумы потока. Однако при увеличении глубины вследствие влияния теплового движения атомов происходит «засыпание» плоскостных теней и, более того, образуются локальные максимумы потока при захвате в режим двойного каналирования (рис. 23). Наряду со сверхканалированием и нормальным каналированием (пятно вблизи начала координат) на этом рисунке наблюдается режим двойного каналирования (ДК) вблизи плоскостей  $\{110\}$ . На относительно малой глубине кристалла 0,5 мкм (рис. 23, *a*) ДК проявляется также вблизи  $\{211\}$ , а на больших глубинах затухает.

Такой процесс приводит к тому, что на больших глубинах кристалла, соизмеримых с величиной нормального проецированного пробега протонов  $R_p$ , из-за процессов многократного рассеяния (деканалирования) и торможения частицы «выживают» (с учетом реканалирования) лишь в близкой угловой окрестности направления кристаллографической оси (в диапазоне полярных углов до  $0,3 \div 0,5 \theta_L$ ) и в режиме двойного каналирования (в диапазоне  $0,5 \div 2,5 \theta_L$  и азимутальных углов существования ДК) вблизи плотноупакованных атомных плоскостей (рис. 24).

При падении пучка в случайном направлении (рис. 25) на первом этапе движения (толщины, не превышающие  $R_p/5$ ) многократное рассеяние вблизи первоначального направления значительно увеличивает угловую ширину пучка. При приближении к направлению кристаллической оси в диапазоне нескольких критических углов Линдхарда малоугловое рассеяние осуществляется в механизме рассеяния атомными цепочками — появляется кольцеобразное распределение и далее происходит объемный захват в режимы ДК. Реканалирование в сверхканалированное состояние также происходит, но на несколько больших глубинах. В результате на больших глубинах, в частности, превышающих нормальный пробег (рис. 25, *в*), их заселенность частицами соизмерима. Такой сценарий объясняет полученный в эксперименте Ходырева и Чуманова [71] парадоксальный эффект: энергетические спектры протонов, упавших на кристалл в случайном направлении, при регистрации малоугловым детектором за кристаллом в направлении двойного каналирования показали меньшие энергетические потери, чем спектры, измеренные вблизи направления кристаллографической оси.

Таким образом, в толстом кристалле наиболее проникающая компонента потока, упавшего в случайном направлении, определяется возникшими в процессах объемного реканалирования частицами в режиме каналирования, при-

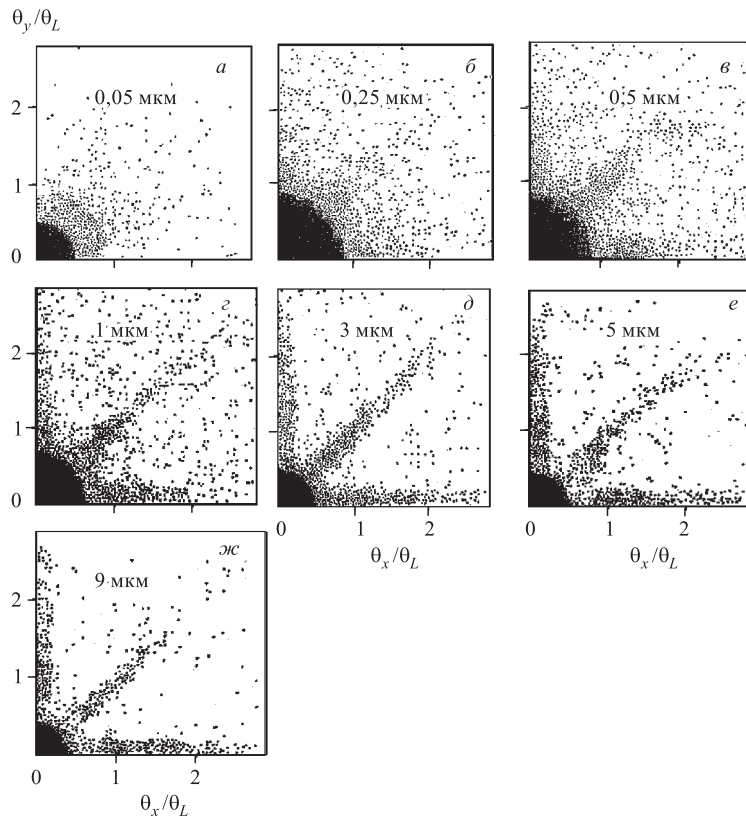


Рис. 24. Фрагменты угловых распределений протонов с начальной энергией 1,5 МэВ, прошедших слой монокристалла золота толщиной  $0,05 \div 9,0$  мкм; нормальный процированный пробег 9,8 мкм [70]. Начальные условия:  $\theta_0 = 0,32\theta_L$  относительно оси  $\langle 100 \rangle$ ,  $\varphi_0 = 20^\circ$  относительно атомной плоскости  $\{100\}$ . Начало координат соответствует направлению оси  $\langle 100 \rangle$ , атомные плоскости  $\{100\}$  расположены под углами  $0$  и  $90^\circ$ , а плоскость  $\{110\}$  — под углом  $45^\circ$  к оси абсцисс. Температура кристалла 300 К. Статистика — 10000 частиц

чем в немаловажной степени частицами, захваченными в режим двойного каналирования. Расчетный пример: протоны с энергией 2 МэВ, упавшие на кристалл вольфрама с  $\theta_0 = 3^\circ$  (относительно оси  $\langle 111 \rangle$ ),  $\varphi = 20^\circ$  (относительно плоскости  $\{110\}$ ),  $\theta_L = 1,13^\circ$  ( $\varepsilon_{\perp 0} \sim 8$ ), т. е. на большом угловом расстоянии от направления оси канала и вне действия режима двойного каналирования (рис. 25). Общее число частиц, прошедших при комнатной температуре слой монокристалла вольфрама толщиной 20 мкм ( $\sim 1,4R_p$ ),

составило  $\sim 18\%$  от упавшего потока (из них в аксиальном канале  $6\%$ , а в режиме двойного каналирования  $5\%$ ). Более полная информация приводится в таблице.

В геометрии ОПП  $\langle 111 \rangle \rightarrow (110)$  ( $\varphi_0 = 0^\circ$ ) моделировались условия чисто плоскостного каналирования (угловое расстояние от оси  $\theta_0 = 6^\circ$ ) и

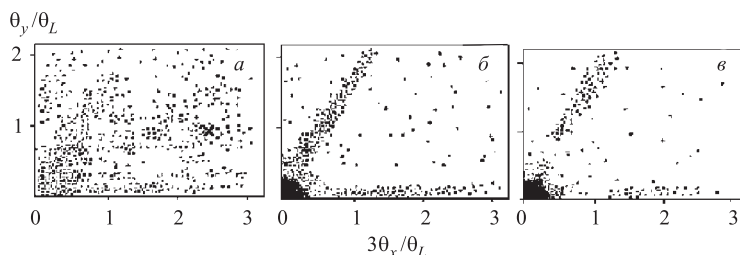


Рис. 25. Фрагменты угловых распределений протонов с начальной энергией 2 МэВ в монокристалле W при комнатной температуре и при начальном направлении движения, соответствующем режиму случайного движения при  $\varepsilon_{\perp 0} \sim 8$  (помечено  $\times$  на рис. а) на различных глубинах (мкм): 1 (а); 10 (б); 20 ( $\sim 1,4R_p$  [70]) (в). Начало координат на рисунках соответствует направлению оси  $\langle 111 \rangle$

**Относительное число прошедших протонов  $N/N_0$ , в том числе  $N_{pl}/N_0$  — в плоскостных каналах и  $N_{ax}/N_0$  — в осевом канале, упавших с энергией 2 МэВ на кристалл вольфрама (в скобках указана доля реканализованных частиц)**

Глубина, мкм	Ориентация пучка	$N/N_0$ , %	$N_{pl}/N_0$ , %	$N_{ax}/N_0$ , %
20 ( $1,4 R_p$ )	Ось $\langle 111 \rangle$ $\theta_0 \sim 0^\circ$	80	(5)	75
10 20	Геометрия перехода ось–плоскость $\langle 111 \rangle \rightarrow (110)$ $\theta_0 = 3^\circ, \varphi_0 = 0^\circ$	100 45	30 (6) 5 (4)	(15) (17)
10 20	Плоскость (110) $\theta_0 = 6^\circ, \varphi_0 = 0^\circ$	100 25	30 7	— —
10 20	Случайная $\theta_0 = 3^\circ, \varphi_0 = 20^\circ$	100 18	(9) (5)	(6) (6)

*Примечание.* Реканализованные в плоскостные каналы целиком связано с заполнением режима двойного каналирования.

двойного каналирования ( $\theta_0 = 3^\circ$ ,  $\theta_L = 1,13^\circ$ ). В первом случае на глубине 10 мкм присутствовало 30 % частиц в режиме плоскостного каналирования из прошедших 100 %, на глубине 20 мкм — 7 % (из прошедших 25 %). Во втором случае на глубине 20 мкм присутствовало 45 % потока; из-за процессов реканалирования в осевом канале (при  $\theta_{\text{out}} < 0,5\theta_L$ ) появилось 17 %, в плоскостном канале сохранилось 5 %, из деканализованных частиц в эту же и в другие плоскости дополнительно захватилось 4 %.

Эти результаты подтверждают важность процессов объемного захвата в режим осевого каналирования (в разные его фракции) в угловой окрестности, составляющей несколько углов Линдхарда от направления оси.

Существование возможности перехода из случайного режима движения в режимы каналирования принципиальным образом отличает режим случайного движения в кристалле от движения частиц в аморфном теле. Отметим также значительное увеличение (в данном случае почти в два раза) заселенности атомной плоскости при приближении направления падения к направлению кристаллографической оси, т. е. в режиме ДК, что может увеличить светосилу при повороте частиц высокой энергии изогнутым монокристаллом, где используется управление пучком атомными плоскостями [14, 34].

Важный вывод заключается в том, что объемное реканалирование связано, в первую очередь, с процессами упругого рассеяния частиц на ядрах колеблющихся атомов кристалла и происходит тем интенсивнее, чем выше температура. Захват в режим двойного каналирования существенно дополняет реканалирование в осевой канал, приближаясь к последнему по заселенности на больших глубинах.

## 8. СРАВНЕНИЕ С РЕАЛЬНЫМИ ЭКСПЕРИМЕНТАМИ

В экспериментах по деканализованию протонов средних энергий разработана [68] техника извлечения из спектров обратного рассеяния информации о  $m(x)$ , где  $x$  характеризует точку деканализования, а  $m$  — отношение потерь энергии на пути в канале к потерям на таком же пути в аморфной мишени (при случайном движении в кристалле). В приведенной работе деканализование в приповерхностных слоях сопровождалось  $m(x) > 1$ , что соответствует высоким значениям поперечной энергии  $\varepsilon_\perp > \varepsilon_{\perp B}(T)$ , возникшим после поверхностного преломления типа (12). Это соответствует результатам расчета рис. 22, где представлена величина, аналогичная  $m(x)$ , но для слоя фиксированной толщины с расшифровкой механизмов, приводящих к описываемому поведению.

Поскольку предшествующие результаты расчетов представлены в безразмерном виде, а также вследствие физически достоверного факта о квазиклассическом поведении [34] релятивистских частиц при каналировании, пред-

шествующие результаты могут быть сопоставлены с такого рода экспериментами. В подтверждение приведем результаты обширных экспериментальных исследований [67] прохождения протонов и пионов релятивистских энергий через монокристаллы германия и кремния в конусе углов с направляющей в окрестности направления оси  $\langle 110 \rangle$  в диапазоне импульсов  $2 \div 15$  ГэВ/с. Угловая расходимость потока частиц из ускорителя для частиц с разными импульсами изменяется в диапазоне, значительно превышающем углы Линдхарда, что приводит к начальным условиям для задачи транспорта частиц высокой энергии в кристалле, сходным с условиями на борту космического аппарата [69], достаточно благоприятным для заселения режима двойного каналирования, начиная с поверхности кристалла. Высокое угловое и энергетическое разрешение в эксперименте позволяют сделать некоторые полезные сравнения. В частности, на угловых распределениях частиц, прошедших кристаллы Ge различной толщины (рис. 26, 27) в окрестности оси  $\langle 110 \rangle$ , ясно выражены частицы ДК в окрестностях плотноупакованных плоскостей  $\{111\}$  и  $\{100\}$  в диапазоне полярных углов до  $2,5 \theta_L$ , далее сменяемые плоскостными тенями. Особенно четко это наблюдается на рис. 27. Картина воспроизводит выход компьютера, обрабатывающего экспериментальные измерения, и показывает относительное распределение интенсивности как функцию входного угла по отношению к оси кристалла для частиц, которые рассеялись на угол, не превышающий  $0,1$  мрад в кристалле. Черные площадки соответствуют высокой интенсивности. Каждая точка показывает интенсивность в ячейке  $0,05 \times 0,05$  мрад. Частицы ДК отделены от центрального пятна осевого каналирования провалом интенсивности, соответствующим минимуму интенсивности при переходе ось–плоскость и резонансному деканалированию. Приведенные в качестве иллюстраций примеры могут быть сопоставлены с результатами компьютерных экспериментов на малых и значительных глубинах кристалла Au (рис. 23, 24).

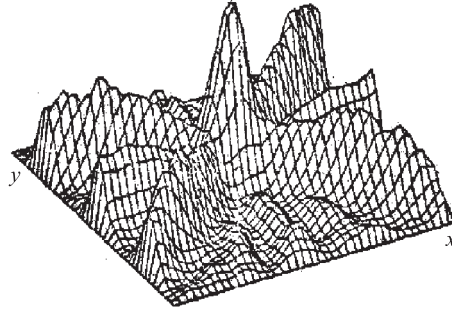


Рис. 26. Угловое распределение [67] пионов  $\pi^+$  с импульсом 6 ГэВ/с, упавших на монокристалл Ge толщиной 0,3 мм, как функция угла падения относительно оси кристалла для частиц, вырезанных в окне низких потерь энергии. Расстояние между линиями  $x$ - и  $y$ -направлений составляет 0,05 мрад. Наблюдается сильный пик в направлении атомной оси. Присутствуют также заметные гребни в направлениях атомных плоскостей  $\{111\}$  с плоскостью  $\{100\}$  между ними. Более слабые плоскости также наблюдаются



Интересен спектр энергий прошедших частиц, приведенный на рис. 28. Присутствие пониженных потерь энергии (окно  $W_1$ ), связываемое с эффектом каналирования, сопровождается увеличенными потерями в диапазоне, превышающем удвоенные средние потери, которые лежат в районе максимума распределения импульсов для окна  $W_2$ . Это подтверждает известный феномен квазиканалирования [5, 68] и соответствует поведению функции потерь энергии (рис. 22).



Рис. 27. Распределение [67] протонов с импульсом 15 ГэВ/с, упавших на монокристалл Ge толщиной 4,2 мм. Как и ранее, положения оси и плоскостей кристалла ясно различимы. Отмечается уменьшение выхода в окрестности угла падения  $\sim 1$  мрад относительно оси и плоскостей. В картине 20000 событий

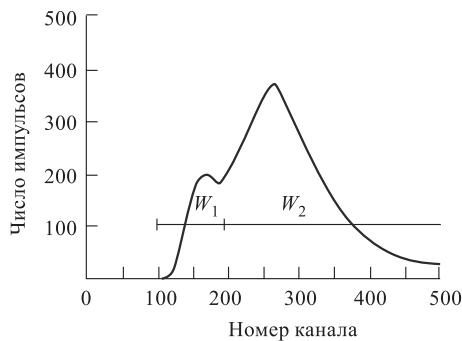


Рис. 28. Распределение импульсов [67] твердотельного детектора после многоканального анализатора. Низкоэнергетическая часть (окно  $W_1$ ) происходит от каналированных частиц, тогда как часть с высокими потерями энергии (окно  $W_2$ ) связана с частицами в режиме случайного движения и режиме квазиканалирования

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Возникающий при определенных условиях непрерывный потенциал в кристаллах при движении быстрых заряженных частиц является специфическим моментом самоорганизации в системе кристалл–частица и определяет в значительной степени свойства потока частиц, обеспечивая взаимодействие ранее отдельно рассматриваемых режимов осевого и плоскостного каналирования. Статистическое описание каналирования получает новое содержа-

ние в картине динамического хаоса, определяемого динамикой движения в непрерывном потенциале кристалла при начальных условиях, реализующих неустойчивые траектории. Регулярное движение реализуется в областях со значительной мерой в фазовом пространстве поперечного движения и в присутствии тепловых колебаний решетки кристалла является стоком (аттрактором) на больших глубинах, обеспечивая вместе с режимом сверхканализования возможность объемного реканализования частиц и появления наиболее длиннопробежных частиц.

Тепловые колебания решетки кристалла с учетом скоррелированности тепловых смещений атомов — близких соседей по атомной цепочке проявляются как второй аспект самоорганизации в системе «быстрая частица–кристалл», обеспечивая существование увеличенного темпа многократного рассеяния и потерь энергии, превышающих нормальные.

Экспериментальные картины канализованных звезд получили, таким образом, свое объяснение в проявлениях различных черт канализованного потока в виде двух компонент режима осевого канализования (нормальное и двойное канализование) и собственно плоскостного канализования, а также объемных механизмов реканализования и двух типов теней (осевой и плоскостной), определяемых начальной ориентацией потока на поверхности кристалла, типом кристалла и его температурой.

По результатам проведенных расчетов для толстого кристалла при начальных условиях, соответствующих случайному движению, выявлена природа наиболее проникающей компоненты потока, обязанной своим появлением процессам объемного реканализования и существующей в виде фракций заселения режима двойного канализования, а также собственно осевого и в меньшей степени плоскостного канализования. Вопрос об эквивалентности режима случайного (не управляемого решеткой) движения в кристалле движению в аморфном теле в связи с явлениями объемного реканализования в толстых слоях кристалла должен быть, скорее всего, решен отрицательно.

Таким образом, развитая теория и вычислительная методика представили свидетельства сложного характера эволюции потока заряженных частиц в кристалле с нелинейным взаимодействием различных режимов, сосуществованием регулярной динамики и динамического хаоса, что не описывается существующими теоретическими (аналитическими) подходами в канализовании, статистическими по своей природе. Теория канализования Линдхарда оказалась необыкновенно продуктивной в части непрерывных потенциалов и введения инвариантов поперечного относительно оси канала движения, создавая при описании движения частиц в кристаллах аналог и обобщение теории рассеяния частиц высокой энергии Глаубера. Вместе с тем полученные угловые распределения и условия существования выявленных режимов движения носят существенно двумерный характер. Аналитическая модель Линдхарда с ее одномерным характером при рассмотрении единственного эволюционного

параметра — поперечной энергии требует дополнительной к проведенной в [39] модификации для включения нового типа диффузионных функций, связанных с фокусировками упорядоченно расположенными АЦ, и рассмотрения новых краевых условий для включения области интенсивного рассеяния в диапазоне нескольких критических углов Линдхарда.

Выявленные новые эффекты (режим двойного каналирования, объемное реканалирование, азимутальное рассеяние и новый механизм потерь энергии, а также режим нормального каналирования (динамического хаоса) с увеличением темпов многократного рассеяния, связанного с фокусирующими свойствами кристалла и параметрическими неустойчивостями при движении в каналах кристалла) должны учитываться при рассмотрении задач ядерной спектроскопии при исследовании ядерных взаимодействий и реакций в кристаллических мишенях. В частности, с их учетом следует ожидать существенных коррекций результатов, полученных при определении времени жизни возбужденных состояний для реакций [10], идущих через составное ядро со значительным пространственным смещением из узла кристаллической решетки, а также при расчете потока релятивистских частиц и интенсивности когерентного излучения в прямых и изогнутых кристаллах [13, 14, 34, 72].

Одновременно следует обратить внимание на пригодность предложенного метода компьютерного моделирования для количественного описания ионной имплантации в кристаллическую мишень, широко используемой при модификации свойств материалов и в технологии твердотельной микроэлектроники.

Авторы благодарят за плодотворные обсуждения своих коллег Г. А. Ифеева, Г. П. Похила и В. А. Ходырева, а последнего специально за любезное предоставление программы вычислений сечений Пуанкаре.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Robinson M. T., Oen O. S.* Computer studies of slowing down of energetic atoms in crystals // *Phys. Rev.* 1963. V. 132. P. 2385–2398.
2. *Nelson R. S., Thompson M. W.* The penetration of energetic ions the open channels in crystal lattice // *Phil. Mag.* 1963. V. 8. P. 1677–1681.
3. Тулинов А. Ф. Влияние кристаллической решетки на некоторые атомные и ядерные процессы // *УФН.* 1965. Т. 87. С. 585–598.
4. Тулинов А. Ф. Об одном эффекте, сопровождающем ядерные реакции на монокристаллах и его использование в различных физических исследованиях // *Докл. АН СССР.* 1965. Т. 162. С. 546–548.
5. *Gemmell D. S., Holland R. E.* Blocking effects in the emergence of charge particles from single crystals // *Phys. Rev. Lett.* 1965. V. 18. P. 945–948.
6. *Lindhard J.* Influence of crystal lattice on the motion of energetic charged particles // *Kgl. Dan. Vid. Selsk. Mat.-Fys. Medd.* 1965. No. 14. (перевод: *УФН.* 1969. Т. 99. С. 249–296).
7. *Channeling: theory, observation and application* / Ed. by D. V. Morgan. London; N. Y.; Toronto: Academic Press, 1973.

8. *Gemmell D.S.* Channeling and related effects in motion of charged particles through crystals // *Rev. Mod. Phys.* 1974. V. 46. P. 129–227.
9. *Chu W.K., Mayer J.W., Nicolet M.A.* Backscattering spectrometry. N. Y., 1978. P. 377.
10. *Карамян С. А., Меликов Ю. В., Тулинов А. Ф.* // ЭЧАЯ. 1973. Т. 4. С. 456.
11. *Tulinov A.F.* On a study of directional phenomena for the nuclear physics aims // *Proc. of the VII ICACS, Moscow, Sept. 19–23, 1977.* M., 1981. V. 1. P. 11–22.
12. *Zhukova Yu.N., Iferov G.A.* The impact-parameter dependence of energy losses in proton scattering by gold atoms // *Phys. stat. solidi (b)*. 1982. V. 110. P. 653–658.
13. *Ахиезер А. И., Шульга Н. Ф.* Электродинамика высоких энергий в веществе. М.: Наука, 1993. 344 с.
14. *Tsyganov E.N.* Some aspects of the mechanism of a charge particle penetration through a monocrystal. Fermilab. ТМ-682-2042.000. Batavia, 1976. 5 p.
15. *Кумахов М. А., Ширмер Г.* Атомные столкновения в кристаллах. М.: Атомиздат, 1980. 192 с.
16. *Ohtsuki Y.-H.* Charged beam interaction with solids. London; N. Y.: Taylor & Francis Ltd., 1983 (Пер.: Оцуки Ё.-Х. Взаимодействие заряженных частиц с твердыми телами. М.: Мир, 1985. 280 с.).
17. *Белошицкий В. В., Кумахов М. А.* Многократное рассеяние каналированных частиц в кристалле // *ЖЭТФ*. 1972. Т. 62. С. 1144–1155.
18. *Bonderup E. et al.* Calculations on axial dechanneling // *Rad. Effects*. 1972. V. 12. P. 261–266.
19. *Shjøtt H.E. et al.* Axial dechanneling. I: A theoretical study // *Proc. of the V ICACS «Atomic collisions in solids».* N. Y.; London, 1975. V. 2. P. 843–849.
20. *Рябов В. А.* Эффект каналирования. М., 1994. С. 240.
21. *Golovchenko J.A.* New analytical solution to the linear Boltzman transport equation with application to channeling // *Phys. Rev. B*. 1976. V. 13. P. 4672.
22. *Barrett J.H.* Breakdown of the statistical equilibrium hypothesis in channeling // *Phys. Rev. Lett.* 1973. V. 31. P. 1542–1545.
23. *Barrett J.H.* Monte Carlo channeling calculation // *Phys. Rev. B*. 1971. V. 3. P. 1527–1547.
24. *Bulgakov Iu. V.* Phenomena observable in the transitions from axial-to-planar channeling // *Proc. of the VII ICACS.* M., 1981. V. 1. P. 41–44.
25. *Bulgakov Iu. V., Shulga V.I.* Transparency oscillations in a silicon crystals in passing from axial-to-planar channeling // *Rad. Effects*. 1976. V. 28. P. 15–21.
26. *Шульга В. И.* Фокусировка ионного пучка парой атомных цепочек и проявление этого эффекта при рассеянии ионов кристаллом // *Тр. VII Всесоюз. совещ. по физике взаимодействия заряженных частиц с кристаллами.* М., 1976. С. 69–75.
27. *Лихтенберг А., Либман М.* Регулярная и стохастическая динамика. М., 1984. С. 526.
28. *Заславский Г. М., Сагдеев Р. З.* Введение в нелинейную физику. От маятника до турбулентности и хаоса. М., 1988. С. 368.
29. *Eltecov V.A. et al.* Computer studies of boron ion channeling in silicon single crystals // *Rad. Effects*. 1972. V. 13. P. 237–242.
30. *Кадменский А. Г., Иферов Г. А., Тулинов А. Ф.* Расчет кольцеобразных распределений частиц, рассеянных тонким монокристаллом // *Тр. V Всесоюз. совещ. по физике взаимодействия заряженных частиц с кристаллами.* М., 1974. С. 20–41.

31. *Ellison J. A., Shui S. T., Gibson W. M.* Momentum density calculations for axial channeling in thin crystals // *Phys. Rev. B.* 1978. V. 18. P. 5963–5976.
32. *Кадменский А. Г. и др.* Исследование режима двойного каналирования // Тр. XI Всесоюз. совещ. по физике взаимодействия заряженных частиц с кристаллами. М., 1982. С. 50–58.
33. *Khodyrev V. A.* Regular and stochastic motion in the lattice potential consequence for axial channeling // *Phys. Rev. Lett. A.* 1985. V. 111. P. 67–71.
34. *Ахизер А. И. и др.* Динамика заряженных частиц высоких энергий в прямых и изогнутых кристаллах // УФН. 1995. Т. 165, № 10. С. 1165–1192.
35. *Кадменский А. Г. и др.* Осевое каналирование в толстом кристалле // Тр. XII Всесоюз. совещ. по физике взаимодействия заряженных частиц с кристаллами. М., 1983. С. 12–17.
36. *Кадменский А. Г., Лебедев Н. Ю.* Исследование динамики осевого каналирования // Тр. XIII Всесоюз. совещ. по физике взаимодействия заряженных частиц с кристаллами. М., 1984. С. 15–22.
37. *Кадменский А. Г.* Регулярное и стохастическое движение в кристалле при каналировании // Ядерная физика и кристаллы: Сб. науч. тр. / Под ред. М. И. Панасюка, Е. А. Романовского, Г. А. Иферова. М., 2001. С. 47–56.
38. *Кадменский А. Г., Самарин В. В.* Выход обратного резерфордского рассеяния ионов при осевом каналировании с учетом торможения // *Поверхность. Физика, химия, механика.* 1985. № 5. С. 44–53.
39. *Кадменский А. Г., Самарин В. В.* Метод усреднения по траекториям: расчет статистически равновесных функций для осевого каналирования и их верификация методом компьютерного моделирования. II // *Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования.* 2002. № 5. С. 98–110.
40. *Кадменский А. Г., Самарин В. В.* Метод усреднения по траекториям при описании осевого каналирования заряженных частиц в кристаллах // *Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования.* 2001. № 5. С. 15–18.
41. *Самарин В. В., Кадменский А. Г.* Учет температурной зависимости при описании и моделировании осевого каналирования // Тр. XII Всесоюз. совещ. по физике взаимодействия заряженных частиц с кристаллами. М., 1983. С. 17–22.
42. *Kitagawa M., Ohtsuki Y. H.* Modified dechanneling theory and diffusion coefficients // *Phys. Rev.* 1973. V. 8. P. 3117–3124.
43. *Nitta H.* Semiclassical theory of dechanneling and the diffusion coefficients // *Phys. stat. solidi (b).* 1985. V. 131. P. 75–86.
44. *Matsunami N., Howe L. M.* A diffusion calculation of axial dechanneling in Si and Ge // *Rad. Effects.* 1980. V. 51. P. 111–126.
45. *Howe L. M. et al.* Axial dechanneling of MeV protons in gold // *Rad. Effects.* 1983. V. 70. P. 197–216.
46. *Gärtner K., Hehl K., Schlotzhauer G.* Axial dechanneling. Perfect crystal // *Nucl. Inst. Meth.* 1983. V. 216. P. 275–286.
47. *Nelson R. S., Thompson M. W., Montgomery M.* Equal-time thermal displacement correlations between atoms of crystal // *Phil. Mag.* 1962. V. 1. P. 1692–1699.
48. *Kadmensky A. G., Tulinov A. F.* Simulation of atomic chain-particle interactions: angular distributions and nuclear diffusion functions // *Proc. of the VII ICACS.* М., 1981. V. 1. P. 49–56.
49. *Sirotnin E. I. et al.* The effect of lattice vibrations on particle dechanneling // *J. Phys. C.* 1982. V. 15. P. 4769–4780.

50. *Кадменский А. Г., Михайлова Е. Е.* Аномально высокий вклад ядерного рассеяния в диффузионную функцию ионов при осевом каналировании // Тез. докл. XXXII Междунар. конф. по физике взаимодействия заряженных частиц с кристаллами. М., 2002. С. 50.
51. *Della Mea G. et al.* // Phys. Rev. B. 1973. V. 7. P. 4029.
52. *Firsov O. B.* The effect of crystal chain discontinuity upon channeling // Rad. Effects. 1974. V. 21. P. 265–272.
53. *Zhukova Yu. N. et al.* Some regularities involved in particle interactions with thin single crystals // Proc. of the VII ICACS. M., 1981. V. 1. P. 56–59.
54. *Жукова Ю. Н. и др.* Рассеяние протонов в тонком монокристалле золота // ЖЭТФ. 1972. Т. 63. С. 217–223.
55. *Armstrong D. P. et al.* A qualitative description on the transverse motion of channeled protons in thin crystals // Rad. Effects. 1972. V. 12. P. 143–147.
56. *Barrett J. H., Appleton B. R., Noggle I. L.* Hyperchanneling // Proc. of the V ICACS «Atomic collisions in Solids» / Ed. by S. Datz, B. R. Appleton, S. D. Moak. N. Y.; London, 1975. V. 2. P. 645–651.
57. *Lenkeit R., Wedell R.* Analytical description of the resonance dechanneling effects in the case of axial-to-planar channeling transition // Phys. stat. solidi (b). 1980. V. 98. P. 235–243.
58. *Крылов Н. С.* Работы по обоснованию статистической физики. М.; Л.: Изд-во АН СССР, 1950.
59. *Kumakhov M. A., Wedell R.* A theory of resonance dechanneling // Phys. stat. solidi (b). 1976. V. 76. P. 119–128.
60. *Иферов Г. А. и др.* Исследование потерь энергии каналированных ионов в геометрии на пролет // Тр. XI Всесоюз. совещ. по физике взаимодействия заряженных частиц с кристаллами. М., 1982. С. 143–148.
61. *Кадменский А. Г.* Учет спектральных распределений вторичных электронов в материалах и структурах МОП БИС при воздействии радиации космоса // Вопр. атомной науки и техники, сер. «Физика радиационного воздействия на радиоэлектронную аппаратуру». 1999. Вып. 1–2. С. 76–88.
62. *Burenkov A. F., Komarov F. F., Kumakhov M. A.* On the energy losses of charged particles in metals and semiconductors and the equilibrium rule of Bohr // Phys. Lett. A. 1976. V. 59, No. 3. P. 233–234.
63. *Cherdyn'tsev V. V., Pokhil G. P., Ryabov V. A.* Scattering of axial channeled particles by atomic strings in crystals // Phys. stat. solidi (b). 1983. V. 117. P. 653–662.
64. *Barrett J. H.* Location of shoulders in channeling phenomena // Phys. Rev. 1968. V. 166, No. 2. P. 219–221.
65. *Bulgakov Yu. V., Lenkeit K., Stolle R.* Energy distribution measurements of 300 keV transmitted protons at the axial-to-planar channeling transition in silicon // Phys. stat. solidi (b). 1983. V. 116. P. K23–K26.
66. *Dearnaley G. et al.* Proton channeling through thin crystals // Phil. Mag. 1968. V. 18. P. 985–1016.
67. *Esbensen H. et al.* Random and channeled energy loss in thin germanium and silicon crystal negative 2–15 GeV/c pions, kaons, and protons // Phys. Rev. B. 1978. V. 18, No. 5. P. 1038–1054.
68. *Rostlyakov V. I. et al.* Analysis of backscattering energy spectra and determination of energy loss of channeling particles // Phys. stat. solidi (a). 1977. V. 43. P. 59–67.

69. *Кадменский А. Г.* Особенности воздействия всенаправленного потока тяжелых заряженных частиц космического пространства при расчете дозового нагружения и вероятности обратных сбоев больших интегральных схем на борту космических аппаратов // *Вопр. атомной науки и техники, сер. «Физика радиационного воздействия на радиоэлектронную аппаратуру»*. 2002. Вып. 1–2. С. 34–43.
70. *Janty J. F.* // *Atom. Data and Nucl. Data Tables*. 1982. V. 27. P. 341–529.
71. *Лебедев Н. Ю., Ходырев В. А., Чуманов В. Я.* Анализ угловых и энергетических характеристик каналированных частиц за толстой мишенью // *Тез. докл. XVIII Всесоюз. совещ. по физике взаимодействия заряженных частиц с кристаллами*. М., 1988. С. 6.
72. *Зимин М. И.* Моделирование процессов прохождения и излучения релятивистских электронов и позитронов при осевом каналировании в кристаллах. Препринт ОИЯИ 1-83-729. Дубна, 1983.