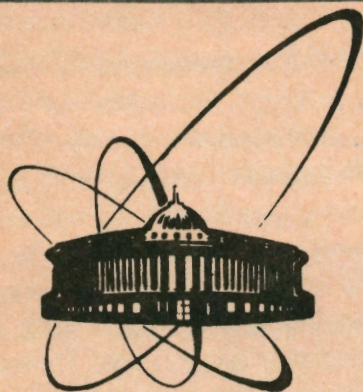


92-396



ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА

P14-92-396

А.С.Боровик*, А.А.Епифанов*, Д.А.Корнеев,
В.С.Малышевский*

ОСОБЕННОСТИ КАНАЛИРОВАНИЯ ИОНОВ
В МОНОКРИСТАЛЛЕ $YBa_2Cu_3O_7$

Направлено в журнал «Физика твердого тела»

*НИИ физики Ростовского государственного университета

1992

1 Введение

Эффект каналирования заряженных частиц послужил фундаментом для создания экспериментальных методов исследования структуры кристаллов [1]. Благодаря уникальным возможностям определять приповерхностные глубинные профили распределений примесей, радиационных дефектов, а также нарушений в кристаллической решетке эти методы находят широкое применение в физике твердого тела [2]. Их преимуществом является высокая чувствительность к смещениям атомов из узлов решетки ($\approx 0.01\text{\AA}$), возможность исследования малых по размерам кристаллов (площадь $\sim 1 \times 1\text{мм}^2$, толщина $\leq 1\text{мкм}$) в отличие от других структурно-чувствительных методов, требующих значительно больших по размеру образцов. Методы каналирования в исследованиях структуры и динамики решетки кристаллов высокотемпературных сверхпроводников (ВТСП) пока не получили широкого развития. Это связано не только с трудностями в проведении экспериментов, но и в значительной степени с проблемами интерпретации экспериментальных данных, получаемых при изучении многокомпонентных мишеней. В последнее время появилось несколько новых работ [3,4], в которых метод каналирования применялся для исследования структуры монокристаллов ВТСП, в том числе при фазовом переходе в сверхпроводящее состояние. Полученные экспериментальные результаты убеждают в актуальности развития теоретических моделей процесса каналирования в многокомпонентных ВТСП-кристаллах. Использование особенностей метода каналирования в этих кристаллах позволяет, как указывалось в работах [5,6], получить новую информацию о структуре кристаллов ВТСП, дополняющую информацию, полученную другими методами, в частности, исследовать глубинную зависимость структуры и динамических свойств кислородной подрешетки в тонких ($\leq 1\text{мкм}$) монокристаллических пленках.

Следует отметить, что ориентационные эффекты при каналировании в однокомпонентных кристаллах допускают сравнительно простое и наглядное описание в рамках классической физики. Однако в случае кристаллов сложного химического состава и структуры

ориентационные эффекты становятся нетривиальными, а их описание требует привлечения более сложных моделей процесса каналирования. Развитию такой модели, описывающей процесс каналирования легких ионов в многокомпонентных низкосимметричных тонкопленочных кристаллах ВТСП, посвящена данная работа.

2 Каналирование ионов в многокомпонентных низкосимметричных кристаллах

Каналирующие частицы выходят из режима каналирования, т.е. деканалируют, вследствие взаимодействия с атомами вещества. Процесс деканалирования в идеальном кристалле, не имеющем структурных нарушений, происходит из-за возбуждения электронов, плазмонов и вследствие рассеяния на колебаниях атомов кристаллической решетки.

Основы теории каналирования были разработаны в 1965 году Линдхардом [7]. Согласно теории Линдхарда, каналирующие в направлении Z частицы движутся в поле непрерывного потенциала $U(r)$. Диффузионная способность $\Delta < E_{\perp} >_c / \Delta z$ (среднее приращение поперечной энергии, отнесенное к единице длины) имеет два важных свойства: а) в случае одноэлектронного возбуждения она пропорциональна локальной плотности электронов n ; б) в случае фононного возбуждения - среднему квадрату амплитуды колебаний атомов.

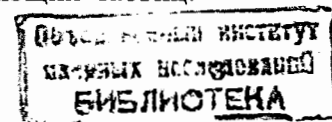
Коэффициент диффузии пучка ионов определяется выражением.

$$D(E_{\perp}) = M_1 \frac{\Delta < E_{\perp} >_c}{\Delta z} \quad , \quad (1)$$

или

$$D(\vec{p}_{\perp}) = \frac{1}{2} \frac{\Delta < \vec{p}_{\perp}^2 >_c}{\Delta z} \quad . \quad (2)$$

Выражение (1) определяет коэффициент диффузии пучка по поперечной энергии, а выражение (2) - по поперечным импульсам, где M_1 - масса налетающих частиц.



С помощью этих коэффициентов можно записать уравнение диффузии, описывающее процесс переноса в направлении, перпендикулярном пучку. В случае осевого каналирования в кристаллах простых химических соединений удобным является одноцепочечное приближение, и уравнение диффузии принимает простой вид:

$$\frac{\partial}{\partial z} g(E_{\perp}, z) = \frac{\partial}{\partial E_{\perp}} \left[D(E_{\perp}) \frac{\partial}{\partial E_{\perp}} g(E_{\perp}, z) \right],$$

где $g(E_{\perp}, z)$ - функция распределения частиц в канале по поперечной энергии E_{\perp} на глубине z .

Одноцепочечное приближение не учитывает реального распределения потенциала в канале и применимо только к кристаллам с высокой степенью осесимметрии усреднённых потенциалов (см., например, рис. 1а). В случае кристаллов сложных химических соединений (например, сегнетоэлектрики, ВТСП и др.) каналы образуются цепочками двух или более типов, состоящими из различных атомов, причём каждый тип цепочки характеризуется своим значением критического угла каналирования Ψ_c и потенциалом $U(r)$. В этом случае осевая симметрия потенциала сохраняется только вблизи атомных цепочек, и подход, основанный на одноцепочечном приближении, некорректен. В таких кристаллах распределение потенциала в канале принимает сложный вид (рис. 1б). Нарушение симметрии потенциала приводит к несохранению углового момента каналированных частиц, который нужно, вообще говоря, учитывать в уравнении диффузии. В импульсном представлении уравнение диффузии для описания процесса деканалирования можно записать в более корректном виде:

$$\frac{\partial}{\partial z} g(\vec{p}_{\perp}, z) = \text{div} [D(\vec{p}_{\perp}) \text{grad}_{\vec{p}_{\perp}} g(\vec{p}_{\perp}, z)], \quad (3)$$

где $g(\vec{p}_{\perp}, z)$ - функция распределения частиц в пространстве поперечных импульсов.

При вычислении коэффициентов диффузии $D(\vec{p}_{\perp})$ необходимо использовать распределение потенциала в виде суммы потенциалов соседних цепочек. Коэффициент диффузии $D(\vec{p}_{\perp})$ в уравнении (3) определяется как среднее по доступной области от зависящего

от поперечных координат коэффициента диффузии $D(x, y)$:

$$D(\vec{p}_{\perp}) = \int_{S(\vec{p}_{\perp})} D(x, y) \frac{dx dy}{S(\vec{p}_{\perp})}, \quad (4)$$

где $S(\vec{p}_{\perp})$ - площадь доступной области внутри элементарной ячейки в поперечной плоскости, т.е. область, где удовлетворяется условие:

$$\frac{\vec{p}_{\perp}^2}{2M_1} \geq U(x, y) - U_{min},$$

где $U(x, y)$ - значение потенциала в поперечной плоскости в точке с координатами (x, y) , U_{min} - минимальное значение потенциала в элементарной ячейке.

Коэффициент диффузии $D(x, y)$ в совершенном кристалле определяется рассеянием на электронах и фононах кристалла:

$$D(x, y) = D_e(x, y) + D_n(x, y).$$

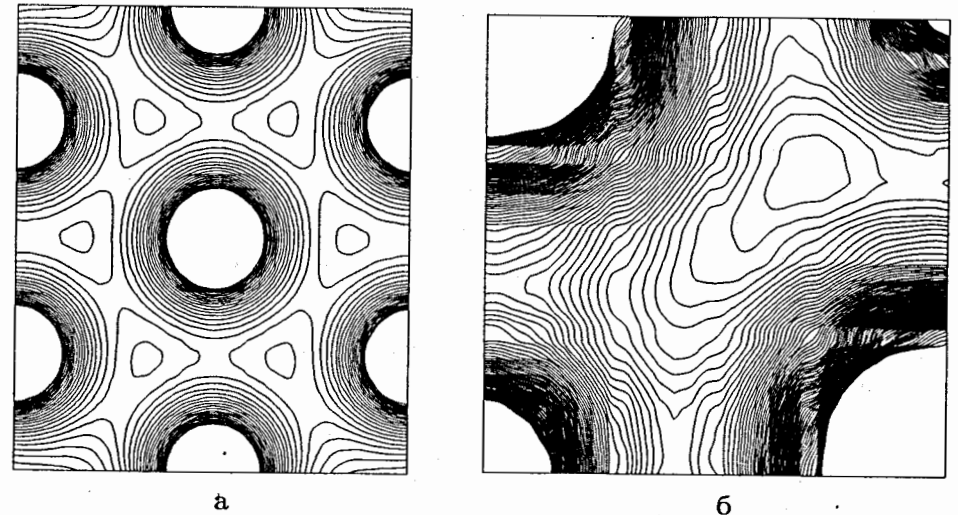


Рисунок 1. Потенциальный рельеф в xy -плоскости, перпендикулярной каналу вдоль оси $\langle 111 \rangle$ в Si (а) и каналу вдоль оси $\langle 001 \rangle$ в $YBa_2Cu_3O_7$ (б). В случае (б) изображена одна четвертая часть сечения канала.

Используя известные выражения из теории каналирования [8], можно определить $D(\vec{p}_\perp)$ в уравнении (2). Электронный коэффициент диффузии $D_e(x, y)$ равен:

$$D_e(x, y) = \frac{2\pi Z_1^2 e^4}{V^2} L_e N_e(x, y), \quad (5)$$

$$L_e = \ln \left(\frac{2mV^2}{I} \right),$$

где $Z_1 \cdot e$, V - заряд и скорость налетающей частицы соответственно, I - средняя энергия возбуждения атомов мишени, $N_e(x, y)$ - распределение электронной плотности по сечению канала, которое в доступной области находится из распределения потенциала в канале в соответствии с уравнением Пуассона:

$$N_e(x, y) = -\frac{\Delta U(x, y)}{4\pi e^2}.$$

Для ядерного коэффициента диффузии $D_n(x, y)$:

$$D_n(x, y) = \frac{2\pi Z_1^2 Z_2^2 e^4}{V^2} L_n N_n(x, y), \quad (6)$$

$$L_n = \ln \left(1.29 \frac{aE}{Z_1 Z_2 e^2} \frac{M_2}{M_1 + M_2} \right),$$

где Z_2, M_2 - атомный номер и масса атомов кристалла соответственно, E - энергия налетающих частиц, a - радиус экранирования.

Для кристаллов сложных химических соединений необходимо в (6) учитывать отдельно вклад атомов каждого сорта. Пространственное распределение атомов кристалла одного сорта $N_n(x, y)$ в поперечной плоскости определяется следующим образом:

$$N_n(x, y) = N \sum_k p_k(x, y),$$

где N - среднее число атомов кристалла данного сорта в единице объёма, $p_k(x, y)$ - плотность вероятности того, что вследствие изотропных тепловых колебаний решётки атом отклоняется на некоторое расстояние от своего равновесного положения (x_k, y_k) :

$$p_k(x, y) = \left(\frac{S_0}{\pi u_1^2} \right) \exp \left\{ -\frac{(x - x_k)^2 + (y - y_k)^2}{u_1^2} \right\},$$

где u_1^2 - среднеквадратичная амплитуда тепловых смещений атомов, S_0 - площадь элементарной ячейки в поперечной плоскости. Плотность вероятности $p_k(x, y)$ нормирована следующим образом:

$$\int dx dy p_k(x, y) = S_0$$

Коэффициент диффузии для кристалла $YBa_2Cu_3O_7$, рассчитанный по формулам (4-6), представлен на рисунке 2.

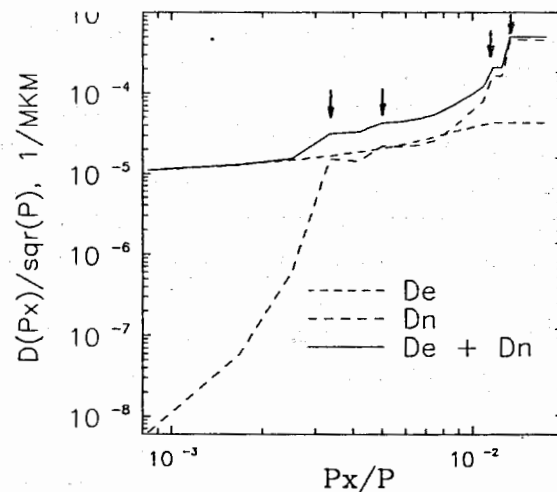


Рисунок 2. Зависимость коэффициентов диффузии D_e и D_n от величины поперечного импульса в канале $\langle 001 \rangle$ кристалла $YBa_2Cu_3O_7$. Стрелками отмечены ступеньки, обусловленные рассеянием на различных атомных цепочках.

При малых поперечных импульсах \vec{p}_\perp диффузия определяется, главным образом, рассеянием на электронах кристалла, и коэффициент диффузии практически не зависит от поперечного импульса.

Увеличение коэффициента диффузии при некоторых значениях поперечного импульса связано с рассеянием на ядрах кристалла, находящихся в различных атомных цепочках.

Первое увеличение на зависимости $D(\vec{p}_\perp)$ (см. рис. 2) связано с рассеянием на атомах кислорода, находящихся в "слабой" кислородной цепочке O(2)-O(2) (см. рис.3). Частицы при таких поперечных импульсах уже не каналируют относительно этих кислородных атомных цепочек, и доступная область захватывает ту часть канала, в которой расположена данная кислородная цепочка. Можно сказать, что критический импульс, соответствующий первой ступеньке $p_c^{\text{кисл}^1}$, является критическим для "слабой" кислородной цепочки. Вторая ступенька соответствует критическому импульсу $p_c^{\text{кисл}^2}$, при котором частицы уже не каналируют относительно "сильных" кислородных цепочек O(4)-O(3) (см. рис.3). Следующие особенности в поведении коэффициента диффузии связаны с рассеянием на смешанных $Cu - O$ и $Y - Ba$ цепочках. При значениях импульсов, больших критического для $Y - Ba$ атомных цепочек, все частицы переходят в хаотическую компоненту пучка. Значение этого импульса p_c можно считать критическим для каналирования вдоль данного направления.

Итак, определив значение коэффициента диффузии для каналирующего пучка в кристалле и подставив значение этого коэффициента в уравнение (3), можно определить функцию распределения частиц $g(p_x, p_y, z)$ по поперечным импульсам в данном кристалле на глубине z . С помощью найденной функции распределения $g(\vec{p}_\perp, z)$ можно вычислять долю неканалированных частиц на глубине z при угле падения пучка ψ_{in} относительно направления канала. Выход обратного рассеяния пропорционален доле неканалированных частиц:

$$\chi(z, \psi_{in}) = 1 - \int_0^{p_c} g(\vec{p}_\perp, z, \psi_{in}) dp_x dp_y . \quad (7)$$

Можно вычислить также относительную плотность потока каналированных частиц в любой точке (x, y) поперечной плоскости канала

на глубине z :

$$F(x, y, z) = \int_{S_1} \frac{S_0}{S(\vec{p}_\perp)} g(\vec{p}_\perp, z) dp_x dp_y + 1 - \int_{S_2} g(\vec{p}_\perp, z) dp_x dp_y , \quad (8)$$

где в первом интеграле интегрирование осуществляется по области S_1 , определяемой условием

$$U(x, y) - U_{min} \leq \frac{p_x^2 + p_y^2}{2M_1} \leq \frac{p_c^2}{2M_1},$$

а во втором интеграле - по области S_2 , определяемой условием

$$\frac{p_x^2 + p_y^2}{2M_1} \leq \frac{p_c^2}{2M_1}.$$

Максимум плотности потока соответствует минимуму потенциального рельефа данной структуры. Используя формулы (7,8), можно вычислить выход процессов близких взаимодействий, например, ядерной реакции, на каких-либо элементах кристалла. Выход ядерной реакции при каналировании находится в виде

$$\chi(z) = n_k + \sum_i n_i F(x_i, y_i, z) , \quad (9)$$

где $F(x_i, y_i, z)$ - значение плотности потока каналированных частиц в точке (x_i, y_i) , где находятся атомы, которые участвуют в ядерной реакции, n_i - относительная концентрация данных атомов в этом положении, n_k - доля разупорядоченных атомов данного сорта. Необходимо, чтобы выполнялось соотношение

$$n_k + \sum_i n_i = 1.$$

3 Алгоритм расчёта функции распределения $g(\vec{p}_\perp, z)$

На основе приведенной выше модели создан пакет программ, позволяющий вычислять угловые зависимости выходов обратного

рассеяния и ядерных реакций при каналировании ионов в кристаллах сложных химических соединений. Для вычислений необходимо знать функцию распределения $g(\vec{p}_\perp, z)$ частиц на глубине z в пространстве поперечных импульсов, которая находится из уравнения (3).

Поскольку пучок ионов, влетающих в кристалл, всегда имеет некоторый угловой разброс, то начальная функция распределения (начальное условие) $g_0(\vec{p}_\perp, 0)$ аппроксимируется распределением Гаусса по поперечным импульсам:

$$g_0(\vec{p}_\perp, 0) = (2\pi\Delta^2)^{-1} \exp\left\{-\frac{(\vec{p}_\perp - p_{in})^2}{2\Delta^2}\right\},$$

где p_{in} - начальный поперечный импульс, Δ - разброс по поперечным импульсам, определяемый условиями эксперимента. Как было сказано выше, при поперечных импульсах, больших, чем критический импульс, частицы выходят из режима каналирования и переходят в хаотическую составляющую пучка. В соответствии с этим граничное условие для уравнения (3) можно задать в виде

$$g_{гр}(p_{кр}, z) = 0,$$

где $p_{кр}$ - значение критического импульса. Однако при таком граничном условии не учитывается процесс возврата частиц из хаотической компоненты пучка в режим каналирования. Более корректно граничное условие задать в виде

$$g_{гр}(p_{гр}, z) = 0,$$

где $p_{гр}$ - значение граничного импульса, причём $p_{гр} > p_{кр}$.

Исходя из этого, получаем условия для нестационарной краевой задачи:

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial z} g(\vec{p}_\perp, z) = \text{div} [D(\vec{p}_\perp) \text{grad}_{\vec{p}_\perp} g(\vec{p}_\perp, z)], \\ g(\vec{p}_\perp, 0) = g_0(\vec{p}_\perp), \\ g(p_{гр}, z) = g_{гр}(p_{гр}, z) = 0. \end{cases} \quad (10)$$

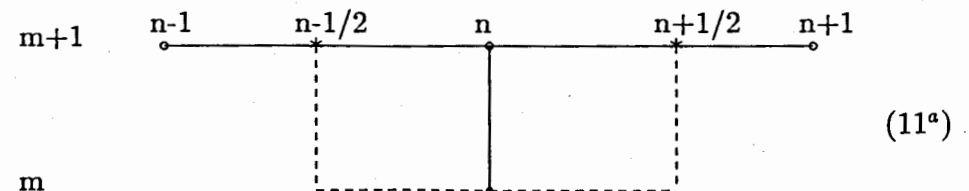
Для решения задачи (10) применялся метод конечных разностей [9],[10]. Так как в уравнении (3) коэффициент диффузии $D(\vec{p}_\perp)$ переменный и почти всегда имеет разрывы первого рода (рисунок 2), то решать это уравнение, применяя простые разностные методы, невозможно. Самым эффективным и надёжным в данном случае является интегро-интерполяционный метод построения разностных схем [11].

Поскольку метод конечных разностей означает переход от непрерывной среды к некоторой её дискретной модели, то при таком переходе естественно требовать, чтобы основные свойства физического процесса сохранялись. В нашем случае это закон сохранения количества частиц. Разностные схемы, выражающие на выбранной сеточной области законы сохранения, называются консервативными. Для получения консервативных разностных схем естественно исходить из уравнений баланса, записанных для элементарных объёмов (ячеек) сеточной области. Входящие в эти уравнения баланса интегралы и производные следует заменить приближёнными разностными выражениями. В результате получим однородную разностную схему.

Запишем уравнение баланса для уравнения (3). В случае одной пространственной координаты уравнение (3) принимает вид

$$\frac{\partial}{\partial z} g(p_x, z) = \frac{\partial}{\partial p_x} \left[D(p_x) \frac{\partial}{\partial p_x} g(p_x, z) \right]. \quad (11)$$

Для уравнения (11) выберем следующий шаблон:



и сопоставим ему ячейку, показанную пунктиром. Обозначая средние точки интервалов полуцелыми индексами, выполним интегри-

рование уравнения (11) по ячейке (11^a):

$$\int_{z_m}^{z_{m+1}} dz \int_{p_{x_{n-\frac{1}{2}}}}^{p_{x_{n+\frac{1}{2}}}} dp_x [g_z - (Dg_{p_x})_{p_x}] =$$

$$= \int_{p_{x_{n-\frac{1}{2}}}}^{p_{x_{n+\frac{1}{2}}}} (g^{m+1} - g^m) dp_x - \int_{z_m}^{z_{m+1}} [(Dg_{p_x})_{n+\frac{1}{2}} - (Dg_{p_x})_{n-\frac{1}{2}}] dz = 0, \quad (12)$$

где $g_z = \frac{\partial g}{\partial z}$, $g_{p_x} = \frac{\partial g}{\partial p_x}$, а g^{m+1} и g^m - значения функции распределения на последующем и предыдущем шаге по глубине соответственно.

Это соотношение является точным. В правой части приближённо вычислим первый интеграл по формуле средних, а второй - по формуле правых прямоугольников [9]. Получим следующее выражение:

$$(\hat{g}_n - g_n) \times (p_{x_{n+\frac{1}{2}}} + p_{x_{n-\frac{1}{2}}}) = \tau [(\hat{D}\hat{g})_{n+\frac{1}{2}} - (\hat{D}\hat{g})_{n-\frac{1}{2}}],$$

где знак $\hat{}$ обозначает значение функций на последующем шаге по глубине.

Заменяя в правой части (12) производные разностями и учитывая, что на равномерной сетке $p_{x_{n+\frac{1}{2}}} - p_{x_{n-\frac{1}{2}}} = h$, получим разностную схему:

$$\frac{1}{\tau} (\hat{g}_n - g_n) = \frac{1}{h^2} [\hat{D}_{n+\frac{1}{2}}(\hat{g}_{n+1} - \hat{g}_n) - \hat{D}_{n-\frac{1}{2}}(\hat{g}_n - \hat{g}_{n-1})], \quad (13)$$

где τ - шаг по глубине, h - шаг по пространству импульсов.

Сделаем замену

$$x_{n+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2} [D(p_{x_n}) + D(p_{x_{n+1}})],$$

$$x_{n-\frac{1}{2}} = \frac{1}{2} [D(p_{x_n}) - D(p_{x_{n+1}})]$$

и перепишем (13) в неявном виде:

$$\frac{1}{\tau} (\hat{g}_n - g_n) = \frac{1}{h^2} [x_{n+\frac{1}{2}}(\hat{g}_{n+1} - \hat{g}_n) - x_{n-\frac{1}{2}}(\hat{g}_n - \hat{g}_{n-1})], \quad (14)$$

Решая систему уравнений (14) методом прогонки и применяя к разностной схеме метод переменных направлений [11], можно определить значение функции распределения частиц в пространстве поперечных импульсов на любой заданной глубине z .

Условие устойчивости явной схемы для уравнения (3) определяется выражением

$$\tau = x \frac{h^2}{D_{max}}, \quad (15)$$

где D_{max} - максимальное значение коэффициента диффузии, x - любое положительное число. Для явной схемы $x \leq 0.5$. Из-за слишком жёсткого условия (15) явная схема решения уравнения (3) требует большого объёма вычислений. В связи с этим явную схему применять неэффективно. В случае неявной схемы x может быть сколь угодно большим, и подбирать его надо, учитывая требования точности решения.

Приведённый алгоритм нахождения функции распределения позволил создать пакет универсальных программ, ориентированных на ЭВМ типа *IBM PC AT*, для вычисления угловых зависимостей выходов обратного рассеяния и ядерных реакций на любой глубине кристалла с произвольной группой симметрии. Программа позволяет рассчитать в 20 точках угловую зависимость выхода с глубины 0,1 мкм для монокристалла $YBaCuO$ за 6 часов на компьютере AT 386.

4 Теоретическое исследование процесса каналирования быстрых лёгких ионов в кристаллах $YBa_2Cu_3O_7$

Элементарная ячейка кристалла $YBa_2Cu_3O_7$ в орторомбической фазе показана на рисунке 3. Значения параметров решётки: $c = 11.67\text{Å}$, $a = 3.82\text{Å}$, $b = 3.86\text{Å}$.

Каналирование ионов вдоль направления $\langle 001 \rangle$ обусловлено взаимодействием потока частиц с атомными цепочками четырех видов: а) цепочками, состоящими из атомов Y и Ba ; б) цепочками, состоящими из атомов Cu и O ; в) кислородными цепочками, состоящими из атомов $O(3)$ и $O(4)$; г) кислородными цепочками, состоящими из атомов $O(2)$. При углах падения пучка $\psi \cong 0$ относительно направления $\langle 001 \rangle$ распределение плотности потока каналированных ионов формируется цепочками всех четырех типов.

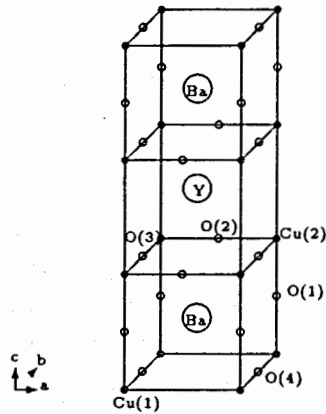


Рисунок 3.

При увеличении угла ψ поперечная энергия E_{\perp} становится больше усреднённых потенциалов более слабых кислородных цепочек в) и г), и распределение плотности потока формируется более "сильными" цепочками а) и б). Ионы каналируют относительно цепочек а) и б) и с большой вероятностью рассеиваются на атомах цепочек в) и г). Распределение плотности потока в канале при различных углах падения ψ показано на рисунке 4.

Поскольку атомы кислорода расположены в трёх различных цепочках, угловая зависимость выхода процессов близкого взаимодействия с атомами кислорода является суперпозицией зависимостей, обусловленных взаимодействием с атомами O в цепочках б), в), и г) (рисунок 5а). "Слабые" кислородные цепочки имеют меньшую ширину угловых зависимостей. На рисунках 5б, 5в, 5г показаны угловые зависимости суммарного выхода взаимодействия с атомами O , вычисленные с учётом весовых коэффициентов, определяемых долями атомов кислорода в каждой цепочке от его общего количества в кристалле. Для малых глубин кристалла на угловых зависимостях для кислорода при углах $0, 35^{\circ} - 0, 50^{\circ}$ наблюдается ступенька, обусловленная различием в ширине угловых зависимостей для различных цепочек. С увеличением глубины z ступенька сглаживается и при $z \geq 0.1$ мкм на месте ступеньки наблюдается небольшой перегиб на угловой зависимости.

Ширина угловой зависимости и положение "ступеньки" определяется величиной усреднённого потенциала кислородных атомных цепочек. Сравнивая угловые зависимости для атомов кислорода, вычисленные для различных значений амплитуды тепловых колебаний и/или статических смещений, перпендикулярных выбранному направлению, с экспериментальными результатами в кристалле $YBa_2Cu_3O_7$, можно определить их величину. Из сравнения экспериментальных угловых зависимостей с теоретическими, полученными отдельно для различных атомов кристалла, можно определить также структурные нарушения кристаллических подрешёток Y , Ba и Cu . Аналогичная форма угловой зависимости выхода ядерной реакции на кислороде в кристалле La_2CuO_4 обсуждалась ранее в [5]. В частности, было показано, что положение и ширина "ступеньки" очень чувствительна к амплитуде тепловых колебаний атомов кислорода.

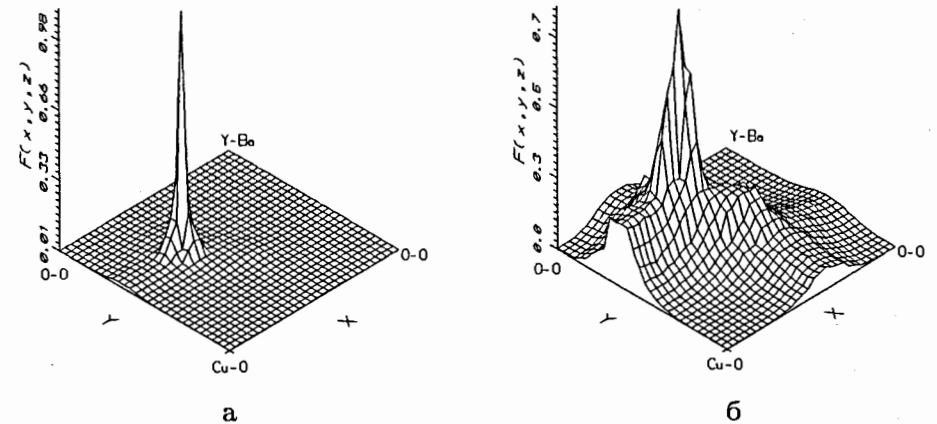


Рисунок 4. Распределение плотности потока каналированных ионов гелия в канале $\langle 001 \rangle$ $YBa_2Cu_3O_7$ на глубине 0.01 мкм (а) и 0.1 мкм (б).

5 Заключение

Таким образом, разработанный подход к описанию ионного каналирования в многокомпонентных кристаллах, не обладающих осевой симметрией, позволяет вычислять основные параметры каналирования для конкретной кристаллической структуры при заданных условиях эксперимента. Это позволит путём сравнения теоретических результатов с экспериментальными, измеренными для различных кристаллографических направлений, с помощью модельной подгонки получать детальную послойную информацию о структурных особенностях кристаллической решетки в приповерхностной области ($\sim 1000 \text{ \AA}$) массивных монокристаллов или в тонких монокристаллических плёнках сложных соединений типа $YBa_2Cu_3O_7$, в частности, определять местоположение смещённых и примесных атомов и степень совершенства кислородной и медной подрешёток.

Авторы благодарят Л.П.Черненко, А.П.Кобзева и Д.М.Широкова за интерес к работе и полезные замечания.

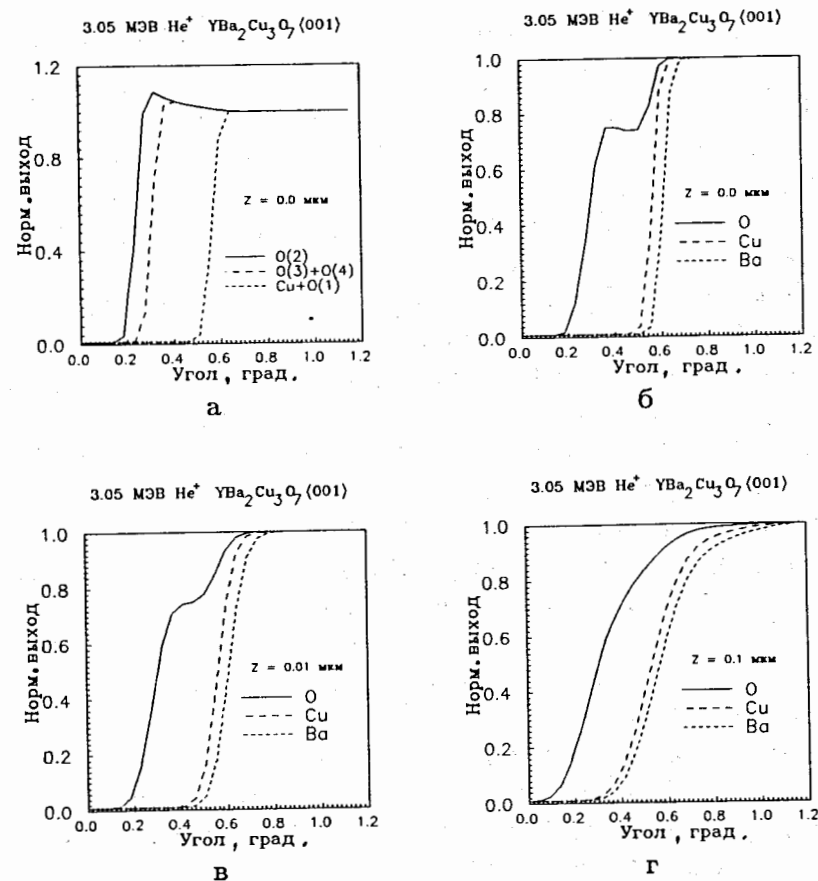


Рисунок 5. Угловые зависимости выхода процессов близких взаимодействий с атомами кислорода, расположенными в трёх различных цепочках - (а) и суммарного выхода от этих цепочек для глубины 0.0 мкм - (б), 0.01 мкм - (в) и 0.1 мкм - (г) кристалла $YBa_2Cu_3O_7$.

Литература

- [1] Комаров Ф.Ф., Кумахов М.А., Ташлыков И.С.
Неразрушающий анализ поверхностей твёрдых тел ионными пучками. Минск, издательство "Университетское", 1987, 256 с.
- [2] Фельдман Л., Майер Д. Основы анализа поверхности и тонких плёнок. М., "Мир", 1989, 342 с.
- [3] Haga T., Yamaya K., Abe Y. Ion-Channeling anomalies at the superconducting transition temperature in single-crystal $YBa_2Cu_3O_{7-y}$. *Phys.Rev.B.*, 41, 1990, N.1, pp 826-829.
- [4] Sharma R.P., Rehn L.E., Baldo P.M.
Comparison of p and He channeling across Tc in $YBa_2Cu_3O_{7-x}$. - *Phys.Rev.B.*, 43, 1991, N.16, pp 13711-13713.
- [5] Borovik A.S., Epiphanov A.A., Malyshevsky V.S., Makarov V.I.
Proton-Channeling Investigation of La_2CuO_4 . *Phys.Lett.A.*, 161, 1992, pp 523-525.
- [6] Макаров В.И., Слабоспицкий Р.П., Скакун Н.А., Боровик А.С., Воронов А.П., Гринченко А.Ю., Малышевский В.С., Олейник В.А. Изучение кристаллической структуры соединения $La_{2-x}Sr_xCuO_4$ с помощью резонансной реакции $^{18}O(p, \alpha)^{15}N$. *Физика низких температур*, т.17, 1991, N.4, с.476-480.
- [7] Lindhard J. Influence of crystal lattice on motion of energetic charge particles. - *Kgl. Danske videuskab. selskab. mat. - fis. medl.*, 34, 1965, N.14.
- [8] Оцуки Е.Х. Взаимодействие заряженных частиц с твёрдыми телами. М., "Мир", 1985, 280 с.
- [9] Поттер Д. Вычислительные методы в физике. М., "Мир", 1975, 392 с.
- [10] Бахвалов Н.С. Численные методы. М., "Наука", 1975, 631 с.
- [11] Самарский А.А. Теория разностных схем. М., "Наука", 1989, 616 с.

Рукопись поступила в издательский отдел
25 сентября 1992 года.

Боровик А.С. и др.
Особенности каналирования ионов
в монокристалле $YBa_2Cu_3O_7$

P14-92-396

В рамках диффузной модели развит подход, позволяющий описать процесс каналирования быстрых легких ионов в приповерхностной области многокомпонентных низкосимметричных кристаллов. Проведенный в работе теоретический анализ процесса каналирования в тонкопленочном монокристалле $YBa_2Cu_3O_7$ показал, что данная структура обладает специфическими особенностями в угловых зависимостях выхода рассеянных ионов, не свойственными однокомпонентным кристаллам. Развитый подход позволит существенно расширить возможности интерпретации экспериментальных данных с целью извлечения деталей о глубинной зависимости структурных и динамических свойств монокристаллических тонких пленок $YBaCuO$.

Работа выполнена в Лаборатории нейтронной физики ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1992

Перевод авторов

Borovik A.S. et al.
Ion Channeling Peculiarities
in $YBa_2Cu_3O_7$ Monocrystal

P14-92-396

The approach was developed in the frame of diffusion model. It permits to describe the fast light ions channeling process for near-surface region of multi-component low-symmetry crystals. Theoretical analysis carried out in the paper for channeling in a thin-film monocrystal $YBa_2Cu_3O_7$ showed, that the given structure has peculiarities of angle dependent yield of scattered ions which is not specific for one-component crystals. Developed approach permits to increase essentially the abilities of an experimental data interpretation, the aim of which is to extract details of the depth dependence of structural and dynamical properties of a thin monocrystal film $YBaCuO$.

The investigation has been performed at the Laboratory of Neutron Physics, JINR.