

РАСЧЕТ ЭВОЛЮЦИИ ПОТОКА ИОНОВ ${}^4\text{He}^+$ В ЖЕЛЕЗО-ИТТРЕВОМ ГРАНАТЕ В РЕЖИМЕ КАНАЛИРОВАНИЯ

В.М. Малютин

г. Томск, Томский политехнический университет

e-mail: mvm@tpu.ru

Феррит-гранаты иттрия и редких земель представляют собой окислы с кубической структурой. Кристаллы имеют общую формулу $\text{R}_3\text{Fe}_5\text{O}_{12}$, в элементарной ячейке которых находится 160 атомов. На одну формульную единицу граната приходится три додекаэдрических, две октаэдрических и три тетраэдрических позиций. Осевое направление $\langle 111 \rangle$ в таких кристаллах является наиболее приоритетным для исследования потока заряженных частиц в режиме каналирования.

Рассмотрев особенности данного кристаллографического направления и применив классический подход к описанию взаимодействия быстрых ионов с атомами кристалла, была составлена программа численного расчета прохождения ионов в канале $\langle 111 \rangle$ $\text{Y}_3\text{Fe}_5\text{O}_{12}$. При этом была использована модель бинарного столкновения налетающих ионов с атомами. Она более точно описывает рассеяние частицы на атомах кристалла в отличие от модели взаимодействия ионов с непрерывным потенциалом атомной цепочки. Для оптимизации расчетов был выделен «эффективный канал» из проекции кристаллической решетки граната на плоскость (111), который вследствие симметрии структуры кристалла был достаточен для рассмотрения в нем эволюции потока ионов.

В параметрах для расчетов задавался идеализированный (без энергетического и углового разброса) источник ионов ${}^4\text{He}^+$ с энергией 1,8 МэВ. В начале расчетов, т.е. на поверхности кристалла, поток из 10000 ионов равномерно распределялся по координатам в «эффективном канале». Для того чтобы получить результаты влияния на поток исключительно кристаллической структуры, в модели не учитывалось рассеяние на тепловых колебаниях атомов. Критерием выхода ионов из режима каналирования является сравнение угловых и пространственных параметров иона с критическим углом каналирования и минимальным прицельным параметром.

В результате расчетов были получены пространственные и угловые распределения потока и нормированные спектры деканалирования для различных начальных направлений потока по отношению к каналу. Из спектров были построены зависимости выхода деканалирования от угла падения потока ионов относительно кристаллографической оси $\langle 111 \rangle$. В них проявляются особенности, которые отсутствуют в ориентационных зависимостях для кристаллов с простой кубической решеткой (ГЦК, ОЦК, алмаз).