

Ion Channeling

Pavao Roko Andričević

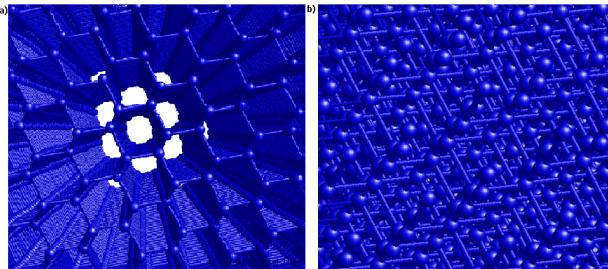
30. siječnja, 2015.

Sažetak

Metodom ion channelinga proučavani su uzorci monokristala silicija i dijamanta. Mjeren je doprinos povratnog raspršenje upadnih protona, energije 1 MeV, od uzorka. Za oba uzorka jasno su pronađeni aksijalni kanali, a za uzorak silicija izračunata je i udaljenost između ravnina atoma kristalne strukture. Svi rezultati su očekivani i u skladu s literaturom.

1 Uvod

Mnogi fizički fenomeni se mogu pojaviti kada nabijene čestice upadnu na čvrstu metu, npr. elastična raspršenja, ne-elastični procesi energetskog gubitka, emisija sekundarnih elektrona, elektromagnetsko zračenje, nuklearne reakcije, itd. Svi ovi procesi imaju udarne presjeke koji ovise o parametrima sudara s pojedinim ciljnim atomima. Kad je materijal mete homogen i izotropan, distribucija parametara sudara je neovisna o orientaciji impulsa upadnih čestica, te su procesi interakcije također neovisni o orientaciji. Kad je meta monokristal doprinosi fizikalnih procesa vrlo snažno ovise o orientaciji impulsa upadnih čestica u odnosu na kristalne osi ili ravnine. Drugim riječima, snaga zaustavljanja čestice je znatno manja u određenim smjerovima od drugih. Ovaj učinak se obično naziva "channeling" efekt¹.



Slika 1: a) 12 nm debeli kristal silicij gledan po kristalografskoj ravnini (110) b) Isti kristal silicija kao pod a) gledan iz nasumično okrenutog smjeru¹.

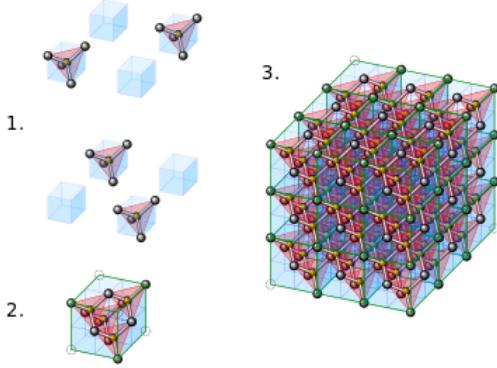
Iz jednostavnog, klasičnog stajališta, može se kvalitativno razumjeti channeling efekt na sljedeći način: Ako se smjer upadnih nabijenih čestica na površinu monokristala nalazi u neposrednoj blizini velikog kristalnog smjera kao što je prikazano na slici 1a., čestice će s velikom vjerojatnošću imati raspršenja malih kuteva kako prolaze kroz nekoliko ravnina atoma u kristalu, a time i dalje ostati u istom kristalnom kanalu. Ako to nije glavni kristalni smjer ili ravnina ("slučajni smjer", prikazano na slici 1b.), mnogo je više vjerojatno da će doći do raspršenja velikih kuteva, a time će njezina konačna srednja dubina prodranja vjerojatno biti kraća. Ako je smjer gibanja čestica

blizu kristalne ravnine, ali nije blizu glavne kristalne osi, ova pojava se zove "plane channeling"¹.

Metoda koja se temelji na channeling efektu je ion channeling. Metoda je vrlo korisna za karakterizaciju kristalne strukture čvrstih tvari. Dobro kulimirana zraka brzo nabijenih čestica udara na kristal u smjeru uskladenom s kristalnim osima, putanje upadnih čestica su isključene iz malog područja oko redova atoma. Prema tome, broj sudara s atomima kristala je značajno manji od "normalnog" broja dobivenog pod non-channeling uvjetima. Ako kristal sadrži defekte koji uključuju atome koji su raseljeni iz atomskih redova, dolazi do povećanja detektiranih čestica zbog sudara s pomaknutim atomima. Prinosom se može precizno izračunati gustoča defekta u nesavršenim kristalima. Osim dobivanja koncentracije grešaka u oštećenim kristalima, tehnike ion channelinga plus kutna skeniranja mogu pružiti informacije o mjestima raseljenih atoma unutar kristalne rešetke. Što je izuzetno korisno u određivanju stabilnih defektnih konfiguracija. Jedna od tehnika ion channeling koju smo mi koristili je Rutherford backscattering spectrometry (RBS)². U tipičnom RBS kutnom skeniranju, snop iona, najčešće protona ili alfa čestica, se uvodi po jednom od velikih kristalnih osi, te se promatra broj povratno raspršenih čestica u ovisnosti o kutu nagiba zrake iona. Uz potpore modeliranja, defektna mjesta se mogu odrediti³.

U našem radu provodit ćemo RBS ion channeling na uzorku monokristala silicija i dijamanta. Mineral dijamant je alotropska modifikacija ugljika, gdje je svaki atom ugljika vezan kovalentno s četiri okolna atoma ugljika, te se nalaze u varijaciji plošno centrirane kubične rešetke nazvane dijamantna rešetka. Dijamanti su prilagođeni za mnoge namjene, jer je materijal iznimnih fizičkih karakteristika. Najistaknutiji su ekstremna tvrdoća i toplinska vodljivost⁴. Silicij je krutina pri sobnoj temperaturi relativno visoke toplinske vodljivosti. U kristaliničnom obliku, čisti silicij ima sivu boju i metalni sjaj. Silicij, kao i ugljen i germanij, se također kristalizira u dijamantnu kubičnu kristalnu strukturu, s razmakom rešetke 0.5430710 nm (5.430710 Å)⁵. Kao što smo rekli oba materijala imaju kristalnu strukturu dijamantne rešetke. Rešetku opisuje uzorak koji se ponavlja. Za dijamantni kubični kristal uzorak su vezani atomi u obliku tetraedra. Svaki takav tetraedar čini jednu primitivnu celiju, koje se tada skla-

paju kao što je prikazano na slici 2. u jediničnu čeliju, čime dobijamo konačnu strukturu dijamantne rešetke. U sklopu ovog seminara nećemo promatrati stabilne defektne konfiguracije. Cilj će nam biti snopom protona energije 1MeV pogoditi kanal u kristalnoj strukturi, te iz mjeđenja izračunati razmak između ravnina atoma u kristalu d . Postupak računa biti će detaljnije obrađen u sljedećem poglavlju.

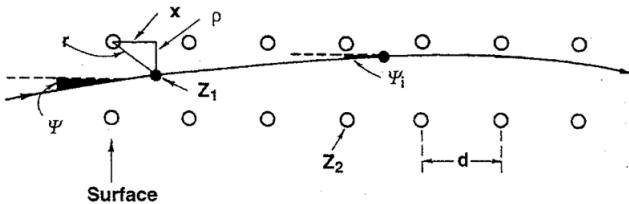


Slika 2: Vizualizacija dijamante kubične jedinične čelije:

1. Komponente jedinične čelije,
2. Jedna jedinična čelija,
3. rešetka 3 x 3 x 3 jedinične čelije⁶.

2 Teorijske osnove

Ion određene energije koji je usmjeren pod malim kutem, Ψ , u odnosu na redove ili ravnine atoma u kristalu doživljava niz slabih sudara s atomima u kristalu. Upravo ovi sudari kontroliraju putanju iona, na način da ga usmjeruju u područja između redaka ili ravnina, kao što je prikazano na slici 3.



Slika 3: Channeling u modelu niza atoma³.

Za ovakav model channelinga sljedeće pretpostavke su potrebne: za upadni ion u kanalu, kutevi raspršenja su mali; uzastopni sudari su u dobroj korelaciji; sudari su potpuno elastični; za opis channelinga, pravi kristal se može aproksimirati savršenim nizovima atoma u kojima je atomski razmak d jedinstven. Za niz korelirajućih sudara, Lindhard (1965.) je pokazao kako se može smatrati da se ion giba u poprečnom potencijalu, V_T , izračunat kao prosječni potencijal svih atoma u nizu. Ovaj prosječni potencijal tako poprima izraz³:

$$V_T(\rho) = \frac{1}{d} \int_{-\infty}^{\infty} V[(\rho^2 + x^2)^{1/2}] dx \quad (1)$$

gdje je ρ udaljenost iona od niza atoma, x udaljenost koju je proputovao duž niza i d udaljenost između atoma u

nizu. Ako se niz sastoji od različitih vrsta atoma, pa je potencijal za svaki atom različit, prosječni potencijal se koristi. Za potencijal $V(r)$ dvaju tijela se općenito uzima Thomas-Fermijev oblik³:

$$V(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} \varphi(r/a) \quad (2)$$

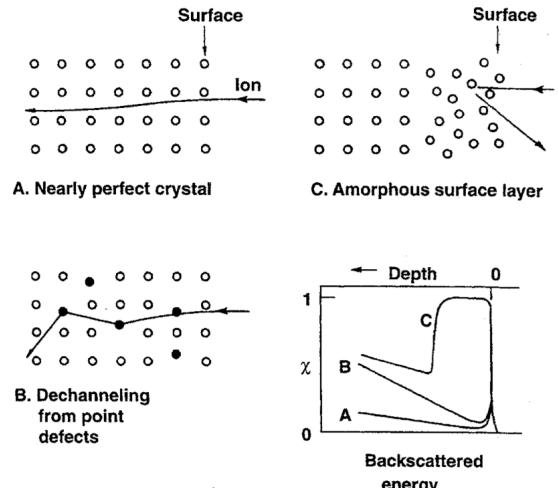
gdje su Z_1 i Z_2 atomski broj iona odnosno atoma iz niza, e je naboj elektrona, r udaljenost između atoma i iona, φ Thomas-Fermijev funkcija zasijenjenja i a duljina zasijenjenja. Treba napomenuti da takav potencijal ne ovisi o brzini iona, tj. neelastična raspršenja su zanemarena. Analitička aproksimacija za $\varphi(r/a)$, razvijen od strane Moliera (1947.), često se koristi u izračunu potencijala. Duljina zasijenjenja a je oblika³:

$$a = 0.8853 a_0 (Z_1^{1/2} + Z_2^{1/2})^{-2/3} \quad (3)$$

gdje je a_0 Bohrov radijus, 5.292×10^{-11} m. Pod uvjetima visoke energije koje koristimo u našem radu, aproksimacija potencijalom izraženim jednadžbom (1) vrijedi, ako je kut upada Ψ manji od karakterističnog kuta Ψ_1 , za kojeg vrijedi³:

$$\Psi_1 = \left(\frac{2 Z_1 Z_2 e^2}{E d} \right)^{1/2} \quad (4)$$

gdje je E energija upadnih iona. Ovaj uvijet proizlazi iz zahtjeva da su mnogi sudari uključeni u raspršenju iona kako prilazi nizu atoma.



Slika 4: Shematski dijagram koji ilustrira raspršenje iona na defektima: a) blaga raspršenja iona u gotovo savršenim kristalima, b) ioni izbačeni iz kanala zbog višestrukih raspšenja na defektima, c) direktno povratno raspršenje od amorfognog površinskog sloja, d) normirani doprinosi triju navedenih mehanizama raspršenja ³.

Slika 4. prikazuje učinke kristalnih nepravilnosti na channeling. Za kanalizirane ione u gotovo savršenim kristalima (slika 4.A), vjerojatnost sudara s atomima rešetke je mala, te je broj povratno raspršenih čestica značajno smanjen. Ako kristal sadrži defekte, čak i malo pomaknute od redova atoma, potencijal niza atoma je poremećen, te su ioni izbačeni iz kanala (slika 4.B). Ako je površinski sloj kristala potpuno poremećen, kao što je prikazano na slici 4.C, prinos povratno raspršenih iona će se

značajno povećati, a vjerojatnost sudara postaje jednaka onoj dobivenom u non-channeling mode-u. slika 4.D prikazuje normirane doprinose gore navedenih mehanizama raspršenja³.

Kut Ψ na kojem normaliziran doprinos pozadinskih raspršenja od domaćih atoma, χ_h , poprima vrijednost aritmetičke sredine njegove minimalne vrijednosti i slučajne vrijednosti (non-channeling) se zove "half-width channeling dip angle" $\Psi_{1/2}$. Njegova ovisnost o Lindhardovom karakterističnom kutu Ψ_1 definiranom u (4) je³:

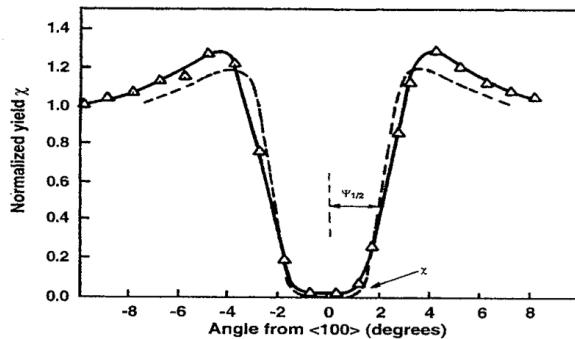
$$\Psi_{1/2} = C_\Psi \Psi_1 \quad (5)$$

gdje je C_Ψ (~ 1) konstanta koja donekle ovisi o vibracijskoj amplitudi atoma. Koristeći rezultate brojnih numeričkih simulacija, Barret (1971.) pokazao je da se kritični kut $\Psi_{1/2}$ može izraziti kao³:

$$\Psi_{1/2} = 0.83 F_{RS}(\xi) \Psi_1 \quad (6)$$

gdje je $\xi = 1.2u_1/a$ (u_1 jednodimenzionalna vibracijska amplituda, a duljina zasijenjenja izračunata pomocu jednadžbe (3)), a $F_{RS}(\xi)$, korijen Molierovg potencijala niza atoma f_M , definiran grafom u literaturi [3].

Primjer oblika doprinosa u ovisnosti o kutu na kanalu može se vidjeti na slici 5. Razlog visokog doprinosa u "ravnenima" udubine je da ioni koji upadaju pod kutevima malo većim od $\Psi_{1/2}$ imaju vjerojatnost veću od prosječne za sudar s atomima niza. Ovi izračuni vrijede samo blizu površine kristala, jer je višestruko raspršenje iona na elektronima i drugim defektima, kao i gubitak energije iona dok prodire kroz kristal, zanemareno.

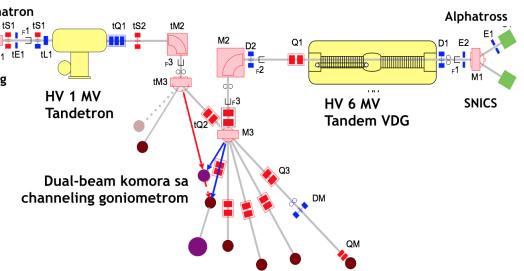


Slika 5: Eksperimentalni i izračunati (isprekidana linija) doprinosi povratnog raspršenja za $\langle 100 \rangle$ aksijalno kanaliziranje zrakom od 480 MeV protona na W pri 309 K (Andersen, 1967.).³

3 Eksperimentalni postav

Mjerenja su vršena na Institutu Ruđer Bošković u Laboratoriju za interakcije ionskih snopova prikazanim na slici 6. Laboratorij ima dva elektrostatska tandem akceleratora (6.0 MV HVEC EN Tandem Van de Graaff i 1.0 MV HVE Tandetron), te 8 eksperimentalnih linija. Jedna od eksperimentalnih linija može u isti čas raditi sa ionskim snopovima iz oba akceleratora. Upravo smo naš seminar radili na toj liniji u dual-beam komori s channeling goniometrom. Za cilj našeg seminara nam nisu bila potrebna

oba akceleratora, pa smo koristili samo 1.0 MV HVE Tandetron. Tandetron akcelerator je opremljen s dva ionska izvora: duoplazmatron s direktnom ekstrakcijom negativnih iona (za vodik), te raspršivački izvor SNICS za ostale ione (npr. Li, C, O, Si itd.)⁷.

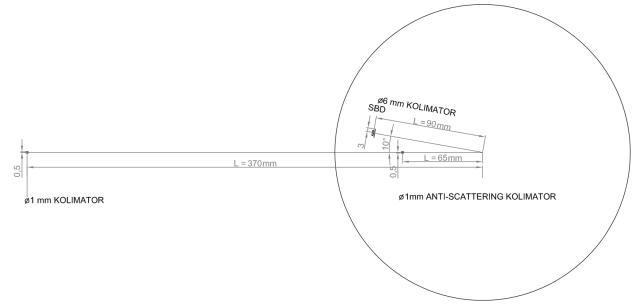


Slika 6: Laboratorij za interakcije ionskih snopova⁷.

Jednostavnu skicu dual-beam komore prikazana je na slici 7. Zraka iona fokusirana je pomoću dvaju kolimatore. Prvim kolimatom promjera 1 mm na udaljenosti 370 mm od uzorka, te anti-scattering kolimatom promjera 1 mm na udaljenosti 65 mm od uzorka. Kako dolazi do rasipanja zrake iona zanimala nas je greška koja će se pojaviti u kutu a računa se po formuli⁸:

$$\delta\theta = 1.177 \frac{r}{L} \quad (7)$$

gdje nam je r polumjer kolimatora, a L njegova udaljenost od uzorka. Iz navedenih udaljenosti u našem slučaju dobili smo da je $\delta\theta = 0.091^\circ < 0.1^\circ$ što smatramo vrlo preciznim.



Slika 7: Skica dual-beam channeling komore.

U sredini komore nalazi se nosač uzorka, kružnog oblika promjera 2.5 cm. Na njega smo postavili naše uzorke monokristala silicija, te dijamanta. Nosač uzorka je pozicioniran pomoću motoriziranog goniometra koji može rotirati uzorak po tri osi. Goniometar ima preciznost manju od 0.05° što nam omogućava vrlo precizno rotiranje kristalne strukture u potrazi za kanalom. Također unutar komore odmaknut za 10° od ulazne zrake iona nalazi se surface barrier poluvodički detektor. Ispred njega postavljen je kolimator promjera 6 mm, te se nalaze na udaljenosti 90 mm od uzorka. Na poluvodički detektor dovodimo napon od +50V pomoću izvora visokonapona Ortec 428. Izlazni signal iz detektora dolazi do prepojačala Ortec

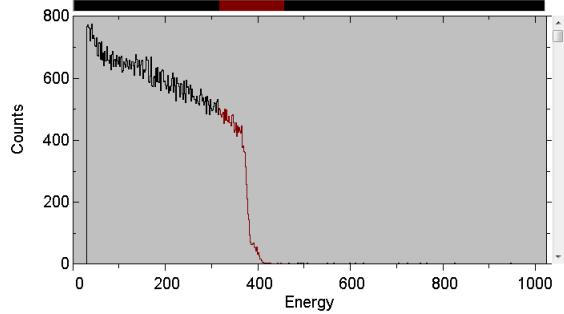
kojeg smo prethodno dobro uzemljili da bi što bolje eliminirali šum. Signal dalje prolazi preko pojačala Ortec 570, te "analog to digital convertera" (ADC) Canberra 8701 do računala na kojem prikupljamo podatke, te promatramo spektar pomoću programskog paketa Spector. U komori smo postigli vakuum, pomoću rotacione i turbomolekulne pumpe, od 5×10^{-6} mbar, te smo tijekom mjerena dobro izolirali sva stakla na komori od svjetla da nebi došlo do oštećenja detektora. Na slici 8. možemo vidjeti sliku komore s goniometrom na vrhu, te ulazne cijevi kroz koje dolaze zrake iona iz akceleratora.



Slika 8: Fotografija dual-beam channeling komore.

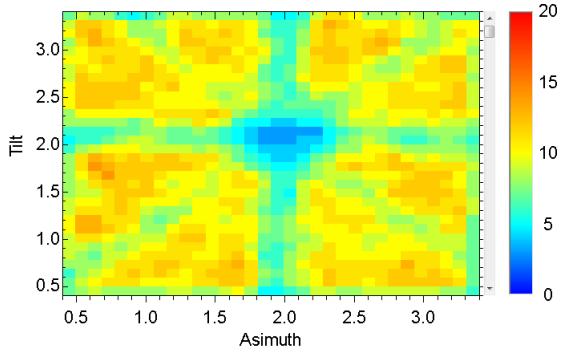
4 Analiza rezultata

Prvo mjereno smo radili na uzorku silicija. Uzorak smo postavili na nosač uzorka u sredini komore, te uključili pumpe da postignemo željeni vakuum za mjereno. Uključili smo zraku protona energije 1 MeV da nam upada na nosač uzorka. Da bi mogli točno pronaći mjesto na kojem upada zraka koristili smo kvarc. Kada zraka protona upadne na kvarc vidimo jaki odsjaj na kameri unutar komore. Položaj svjetla označimo na ekranu kao položaj zrake protona. Na kraju pomoću goniometra namjestimo da se položaj našeg uzorka poklapa s položajem zrake protona. Kada izoliramo komoru od svjetla i postignemo željeni vakuum, uključimo zraku protona i prikupljamo RBS spektar za vrijeme od 1300 s kojeg možemo vidjeti na slici 9. Mjerili smo istovremeno struju na uzorku, o kojoj nam ovisi broj dogadaja, a time i statistika rezultata. Dobili smo struju $I = 2\text{nA}$ sto je zadovoljavajuće.



Slika 9: RBS spektar za upadnu zraku protona energije 1 MeV na uzorak Si za (100) kanaliziranje

Vidimo da nam spektar odgovara tipičnom spektru non-channeling mehanizma, prikazanom na slici 4.D. Idući korak nam je pomoću goniometra rotirati uzorak oko dvije osi u pokušaju da nam upadni protoni pogode kanal. Postavili smo postavke da nam goniometar rotira uzorak za 8° u azimut smijeru i 8° u tilt smijeru, kreirajući mapu od 16×16 piksela. Vrijeme mjerena za svaki piksel je 10 s, te će imat preciznost $0.5^\circ \times 0.5^\circ$. Također iz slike 4.D. možemo vidjeti da nam je najveća razlika u doprinisu između channeling i nonchanneling mehanizma u području blizu površine uzorka, tj kanalima viših energija. Iz tog razloga ćemo promatrati samo događaje unutar crvenog područja RBS spektra sa Slike 9. Promatrujući dobivene mape i pomicući uzorak možemo locirati položaj kanala te izvesti preciznije mjereno, stvoriti mapu od 32×32 piksela uz rotaciju kuteva $3^\circ \times 3^\circ$, što nam daje odličnu preciznost od 0.09° po pikselu. Dobivena mapa ion channelinga na Si prikazana je na Slici 10.



Slika 10: Prikaz kanala za uzorak silicija za (100) aksijalno kanaliziranje

Iz mjerena smo tada preuzeeli niz doprinosa koji obuhvaćaju aksijalni kanal, ali ne i planarne kanalne osi te na slici 11. prikazali ovisnost normaliziranog doprinosa u ovisnosti o kutu rotacije od osi centra kanala. Pomoću programskog paketa Qtiplot smo analizirali graf gausovom krivuljom, te izračunali "full width at half maximum" (FWHM) koji odgovara našem kutu $\Psi_{1/2}$ definiranog u jednadžbi (6):

$$w = \Psi_{1/2} = (0.54 \pm 0.04)^\circ \quad (8)$$

Iz literature [3] smo isčitali vrijednosti za silicij $a = 0.0194 \text{ nm}$, $u_1 = 0.0075 \text{ nm}$, te $F_{RS}(\xi) = 1.11$ i izraču-

nali pomoću izraza (6) krakteristični kut Ψ_1 :

$$\Psi_1 = (0.59 \pm 0.04)^\circ \quad R = 7\% \quad (9)$$

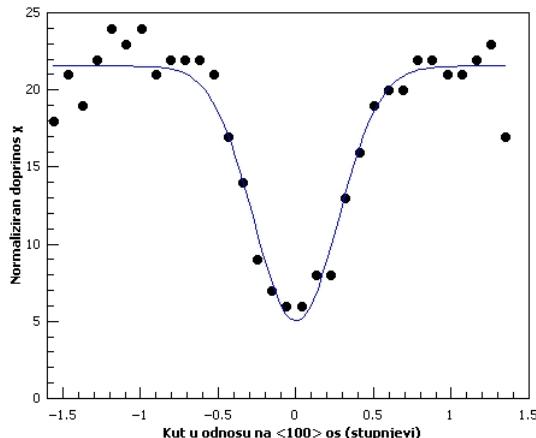
Konačno pomoću varijacije izraza (4)³:

$$\Psi_1 = 0.307(Z_1 Z_2 / Ed)^{1/2} \quad (10)$$

gdje je d u jedinicama 10^{-8} cm, a energija iona E u MeV, možemo izračunati razmak između ravnina atoma u kristalnoj strukturi d :

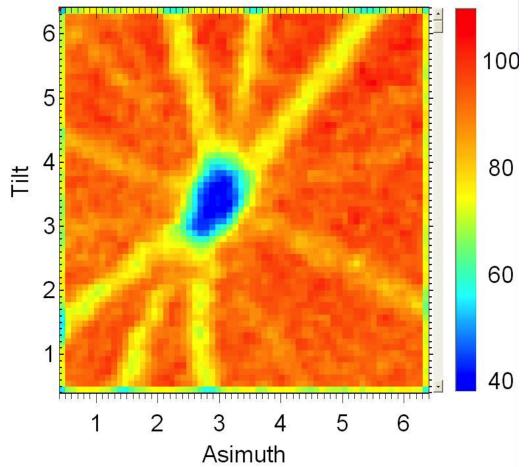
$$d = (0.38 \pm 0.05) \text{ nm} \quad R = 13\% \quad (11)$$

Graf ovisnosti doprinosa o kutu nam je očekivan i odgovara onom iz literature prikazanom na slici 5. Jasno je vidljiv položaj kanala, te je izračunat kritični kut Ψ_1 s malom greškom. Konačni rezultat za razmak između ravnina atoma d nam značajno ne odstupa od očekivane veličine iz literature navedene u uvodu.



Slika 11: Ovisnost doprinosa o kutu rotacije oko osi kanala za (100) aksijalno kanaliziranje silicija zrakom protiona energije 1 MeV

Idući cilj nam je bio probati dobiti kanaliziranje ionima za uzorak dijamanta za orijentaciju (111). Ponavljali smo isti postupak kao za silicij, kreirajući mape 16×16 za rotaciju kuteva $8^\circ \times 8^\circ$. Rezultati nam nisu bili uspješni, nismo dobivali nikakve naznake mogućih kanala. Mislili smo da je razlog u tome što kristalna struktura dijamanta nije bila kvalitetna, tj da je dijamant imao veliki broj defekata. Na kraju smo došli do ideje da probamo zraku protiona uvesti na kristalnu rešetku dijamanta pod kutem od 45° . To nam je rezultiralo trenutnim pronalaskom kanala prikazanom na slici 12. Zbog ograničenosti u vremenu nisam stigao provesti obradu podataka i izračun razmaka između ravnina atoma. Ipak iz slike možemo vidjeti jasno prepoznavanje kanala na CVD dijamantu.



Slika 12: Prikaz kanala za uzorak CVD dijamanta za (111) aksijalno kanaliziranje

5 Zaključak

U ovom radu upoznali smo se s metodom ionskog kanaliziranja (*ion channeling*), posebno tehnikom Rutherfordovog povratnog raspršenja. Primjenili smo metodu na uzorce monokristala silicija i dijamanta, materijale kristalne strukture dijamantne rešetke. Za silicij smo očekivano lagano na RBS spektru pronašli položaj jednog aksijalnog kanala (100), te iz izmjerениh podataka mogli smo izračunati, s dobrom preciznosću, razmak između atomskih ravnina u kristalu $d = (0.38 \pm 0.05) \text{ nm}$. Rezultat je u skladu s vrijednostima danim u literaturi. Prvi eksperiment na dijamantu nije dao uspjeha u pronalasku kanala, međutim tehnikom uvođenja ionskog snopa pod kutem od 45° na uzorak, eksperiment je dao dobre rezultate i jasnu sliku aksijalnog kanala (111) prikazanog na slici 12. Pri opisivanju aparature receno je da se eksperiment radio u dual-beam komori u kojoj istovremeno možemo imati zrake iona iz oba akceleratora na uzorku. Iduća zamisao bi bila da zraku iz prvog akceleratora pozicioniramo u smjeru za uspješno kanaliziranje, a istovremeno izlažemo uzorak zraci iona iz drugog akceleratora. Na taj način možemo promatrati oštećenja zračenjem uzorka u vremenu. Promatralo bi se brzina sužavanja kanala u ovisnosti o parametrima ionskog snopa koji stvara ostećenje. Dijamant je upravo izabran kao uzorak zbog potencijalne primjene kao materijal za izgradnju stakala na nuklearnom fuzionom reaktoru u sklopu međunarodnog istraživačkog i inženjerskog projekta ITER.

Literatura

- [1] Wikipedia Channeling (physics) [http://en.wikipedia.org/wiki/Channelling_\(physics\)](http://en.wikipedia.org/wiki/Channelling_(physics))
- [2] Wikipedia Rutherford backscattering spectrometry http://en.wikipedia.org/wiki/Rutherford_backscattering_spectrometry
- [3] Yongqiang Wang and Michael Nastasi *Handbook of modern ion beam materials analysis*

- [4] Wikipedia Diamond <http://en.wikipedia.org/wiki/Diamond>
- [5] Wikipedia Silicon <http://en.wikipedia.org/wiki/Silicon>
- [6] Wikipedia Diamond cubic http://en.wikipedia.org/wiki/Diamond_cubic
- [7] <http://www.irb.hr/Istrazivanja/Zavodi-i-centri/Zavod-za-eksperimentalnu-fiziku/Laboratorij-za-interakcije-ionskih-snopova>
- [8] D. Dieumegard, D. Dubreuil, G. Amsel *Nucl. Instr. and Meth.* 166 (1979) 431-445