

<https://doi.org/10.15388/vu.thesis.554>

<https://orcid.org/0000-0002-3379-1350>

VILNIAUS UNIVERSITETAS
FIZINIŲ IR TECHNOLOGIJOS MOKSLŲ CENTRAS

Danielius Lingis

Skaitinis lengvųjų jonų atgalinės sklaidos spektrų modeliavimas dalelių kanaliavimo geometrijoje

DAKTARO DISERTACIJA

Gamtos mokslai,
Fizika (N 002)

VILNIUS 2023

Disertacija rengta 2017–2023 metais VMTI Fizinių ir technologijos mokslų centre.

Mokslinius tyrimus rėmė Lietuvos mokslo taryba.

Mokslinis vadovas – dr. Vitalij Kovalevskij (VMTI Fizinių ir technologijos mokslų centras, gamtos mokslai, fizika, N 002).

Mokslinis konsultantas – dr. Artūras Plukis (VMTI Fizinių ir technologijos mokslų centras, gamtos mokslai, fizika, N 002).

Gynimo taryba:

Pirmininkas – prof. habil. dr. Leonas Valkūnas (Vilniaus Universitetas, gamtos mokslai, fizika, N 002).

Nariai:

dr. Gediminas Gervinskas (Monash universitetas, gamtos mokslai, fizika – N 002),

dr. Kęstutis Mažeika (Fizinių ir technologijos mokslų centras, gamtos mokslai, fizika – N 002),

prof. dr. Saulius Mickevičius (Vytauto Didžiojo universitetas, gamtos mokslai, fizika – N 002),

dr. Gediminas Stankūnas (Lietuvos energetikos institutas, gamtos mokslai, fizika – N 002).

Disertacija ginama viešame Gynimo tarybos posėdyje 2023 m. lapkričio mėn. 28 d. 10 val. VMTI Fizinių ir technologijos mokslų centre, Fizikos instituto posėdžių salėje. Adresas: Savanorių pr. 231, Vilnius, Lietuva, tel. +370 5 266 1640/1643; el. paštas: office@ftmc.lt.

Disertaciją galima peržiūrėti Fizinių ir technologijos mokslų centro bei Vilniaus universiteto bibliotekose ir VU interneto svetainėje adresu:

<https://www.vu.lt/naujienos/ivykiu-kalendorius>

<https://doi.org/10.15388/vu.thesis.554>

<https://orcid.org/0000-0002-3379-1350>

VILNIUS UNIVERSITY

CENTER FOR PHYSICAL SCIENCES AND TECHNOLOGY

Danielius Lingis

Numerical Simulation of the Light Ion Backscattering Spectra in the Particle Channeling Geometry

DOCTORAL DISSERTATION

Natural Sciences,
Physics (N 002)

VILNIUS 2023

The dissertation was prepared between 2017 and 2023 at the Center for Physical Sciences and Technology.

The research was supported by Research Council of Lithuania.

Academic supervisor – Dr. Vitalij Kovalevskij (Center for Physical Sciences and Technology, Natural Sciences, Physics, N 002).

Academic consultant – Dr. Artūras Plukis (Center for Physical Sciences and Technology, Natural Sciences, Physics, N 002).

This doctoral dissertation will be defended in a public meeting of the Dissertation Defence Panel:

Chairman – Prof. Habil. Dr. Leonas Valkūnas (Vilnius University, Natural Sciences, Physics, N 002),

Members:

Dr. Gediminas Gervinskas (Monash University, Natural Sciences, Physics, N 002),

Dr. Kęstutis Mažeika (Center for Physical Sciences and Technology, Natural Sciences, Physics, N 002),

Prof. Dr. Saulius Mickevičius (Vytautas Magnus University, Natural Sciences, Physics, N 002),

Dr. Gediminas Stankūnas (Lithuanian Energy Institute, Natural Sciences, Physics, N 002).

The dissertation shall be defended at a public meeting of the Dissertation Defence Panel at 10:00 on 28th of November 2023 in meeting room of the Institute of Physics, Center for Physical Sciences and Technology. Address: Savanoriu ave. 231, Vilnius, Lithuania

Tel. +370 5 266 1640/1643; e-mail: office@ftmc.lt.

The text of this dissertation can be accessed at the libraries of Center for Physical Sciences and Technology and Vilnius University, as well as on the website of Vilnius University:

www.vu.lt/lt/naujienos/ivykiu-kalendorius

SANTRUMPOS

RBS – (angl. *Rutherford Backscattering Spectroscopy*) Rezerfordo atgalinės sklaidos spektroskopija;

RBS/C – Rezerfordo atgalinės sklaidos spektroskopija dalelių kanaliavimo geometrijoje;

RTR – (angl. *Relative To Rutherford, Ratio To Rutherford*) daugiklis, rodantis teorinio (rekomenduojamo) sklaidos skerspjūvio (kartu su rezonansinėmis juostomis) santykį su grynuoju Rezerfordo sklaidos skerspjūviu;

AMU – (angl. *atomic mass unit*) atominis masės vienetas, $1 \text{ amu} = 1,66053907 \times 10^{-27} \text{ kg}$;

FWHM – (angl. *Full Width at Half Maximum*) atstumas tarp dviejų kreivės taškų ties puse amplitudės maksimumo;

TFU – (angl. *Thin Film Units*) optinių dangų analizėje naudojamas dydis medžiagos storiui nusakyti, $1 \text{ TFU} = 10^{15} \text{ at/cm}^2$;

NIST – *National Institute of Standards and Technology*, valstybinė fizinių mokslų laboratorija JAV.

TURINYS

ĮVADAS	9
Temos aktualumas.....	9
Darbo tikslas ir uždaviniai.....	11
Asmeninis indėlis.....	11
Darbo naujumas	12
Disertacijos išdėstymas	13
Ginamieji teiginiai.....	13
Publikacijos.....	14
Pranešimai konferencijose.....	16
Darbo metu sukurti skaitiniai modeliai.....	17
1. Literatūros apžvalga	18
1.1. Elektringųjų dalelių sąveika su medžiaga.....	18
1.2. Rezerfordo atgalinės sklaidos spektroskopija.....	19
1.3. Elektringųjų dalelių kanaliavimas	20
1.4. Kanaliavimo sąlygos.....	22
2. Atgalinės sklaidos spektrų nuo amorfinių medžiagų skaitinis modelis	23
2.1. Darbe palyginimui naudoti papildomi programiniai paketai	24
2.1.1. SRIM–2013 programinis paketas	24
2.1.2. SIMNRA ir WiNDF programiniai paketai	24
2.2. Rezerfordo atgalinės sklaidos modelis GEANT4 programiniame pakete.....	25
2.3. Rezerfordo atgalinės sklaidos reakcijos skerspjūvio vertinimas.....	27
2.4. Energijos nuostolių vertinimas ir stabdomoji geba atgalinės sklaidos modelyje.....	29
2.5. Dalelių energijos išsibarstymo vertinimas.....	32
2.6. Dalelių daugkartinė sklaida.....	34
2.7. Detektoriaus parametrai ir spektro skaitinis modeliavimas	36
2.8. Eksperimentinė atgalinės sklaidos spektrų matavimo aparatūra.....	37

2.9.	Rezultatai	39
2.9.1.	Atgalinės sklaidos reakcijos skerspjūvio vertinimas	39
2.9.2.	Daugkartinės dalelių sklaidos įtaka	43
2.9.3.	Teorinių ir eksperimentinių spektrų palyginimas	45
2.9.4.	Protonų atgalinė sklaida nuo SiO ₂ bandinio	46
2.9.5.	Protonų ir ličio jonų atgalinė sklaida nuo HfO ₂ /FS SiO ₂ bandinio	47
2.9.6.	Protonų atgalinė sklaida nuo SiO ₂ /Nb ₂ O ₅ /FS SiO ₂ bandinio	50
2.9.7.	He ⁺ atgalinė sklaida nuo Au/Ni/SiO ₂ /Si bandinio	51
2.10.	GEANT4 atgalinės sklaidos modelio rezultatų apibendrinimas	53
3.	Dalelių kanaliavimo modelis GEANT4 programinio paketo aplinkoje	54
3.1.	Kristalinių charakteristikų vertinimas ECHARM paketu	54
3.2.	Dalelių kanaliavimo skaitinis modeliavimas GEANT4 aplinkoje	55
3.3.	Dalelių kanaliavimo skaitinis modeliavimas FLUX7 aplinkoje	58
3.4.	Rezultatai	59
3.4.1.	Kristalų charakteristikų įvertinimas	59
3.4.2.	Energijos nuostolių ir kritinio kampo validavimas	62
3.4.3.	Protonų energijos nuostoliai silicyje išilgai <111> ašies	67
3.4.4.	Protonų stabdomosios gebos silicyje išilgai <111> ašies	69
3.4.5.	Efektyviųjų stabdomųjų gebų vertinimas germanio kristale	71
3.4.6.	Efektyviųjų stabdomųjų gebų vertinimas galio arsenido kristale	76
3.5.	Dalelių kanaliavimo modelio rezultatų apibendrinimas	80
4.	Kanaliuojančių dalelių atgalinės sklaidos modelis	82
4.1.	Amorfinių medžiagų GEANT4 RBS modelio modifikacija atsižvelgiant į jonų kanaliavimą	82
4.2.	Tyrime naudotos medžiagos	83
4.3.	Skaitinio modeliavimo ir eksperimentų metodika	86
4.4.	Rezultatai	87
4.4.1.	Rezonansinių juostų priklausomybė nuo kanaliavimo sąlygų	87
4.4.2.	Atgalinė sklaida kanaliuojant išilgai <100> ašies silicyje	90
4.4.3.	Atgalinė sklaida kanaliuojant išilgai <110> ašies silicyje	94

4.4.4. Atgalinė sklaida kanaliuojant išilgai $\langle 111 \rangle$ ašies silicyje	96
4.4.5. Atgalinė sklaida nuo silicio karbido kristalo	99
4.4.6. Atgalinė sklaida nuo silicio dioksido kristalo.....	102
4.4.7. Atgalinė sklaida nuo deimanto kristalo	104
4.5. Kanaliavimo atgalinės sklaidos modelio rezultatų apibendrinimas .	107
IŠVADOS	109
SUMMARY	110
LITERATŪROS SĄRAŠAS.....	130
Gyvenimo aprašymas	140
PADĖKA	141
PUBLIKACIJŲ SĄRAŠAS	142
UŽRAŠAMS.....	143

ĮVADAS

Temos aktualumas

Puslaidininkų struktūrų savybes stipriai keičia priemaišos ir defektai, todėl šių struktūrų tobulinimams ir tyrimams būtina įvertinti defektų evoliucijos procesus. Egzistuoja daug įvairių metodikų, kurios leidžia stebėti defektų evoliuciją: Ramano spektroskopija [1], antrinių jonų masių spektroskopija (angl. *Secondary Ion Mass Spectroscopy*, SIMS) [2], Rentgeno spindulių difrakcija (angl. *X-Ray Diffraction*, XRD) [3], jonų pluoštelio analizės metodai [4] ir kt. Kiekviena metodika turi savo privalumų ir trūkumų – nuo destruktivios (pvz. SIMS) iki mažai skvarbios (pvz. Ramano spektroskopija). Labiausiai populiarūs jonų analizės metodai yra Rezerfordo atgalinės sklaidos spektroskopija (angl. *Rutherford backscattering spectroscopy*, RBS), dalelių sužadintosios Rentgeno spinduliuotės spektroskopija (angl. *Particle Induced X-ray Emission*, PIXE) ir elastinių atatrangų spektroskopija (angl. *Elastic Recoil Detection*, ERD). Šios metodikos remiasi elektringųjų dalelių sąveika su medžiaga ir pirminių (atgal išsklaidytų) ar antrinių (naujai sugeneruotų) dalelių detektavimu bei energinio spektro interpretavimu. Tai jautrios, sąlyginai nedestruktivios metodikos, leidžiančios tirti medžiagų savybes nedideliame bandinių gylyje. Šių technikų jautrumas žymiai padidėja, kai kristalinėms medžiagoms matavimai atliekami dalelių kanaliavimo geometrijoje [5], [6]. Dalelių kanaliavimas yra procesas, kai tvarkingose kristalinėse struktūrose lygiagrečiai kristalinėms ašims krintančios dalelės yra fokusuojamos į ertmę tarp atomų grandinėlių, patiriant tik koreliuotus mažo kampo susidūrimus [7]. Tokiu atveju dalelės keliauja mažo krūvio tankio regionuose, todėl sumažėja sklaidos ar branduolinės reakcijos tikimybės, o taip pat gaunami mažesni dalelių energijos nuostoliai lyginant su amorfinėmis medžiagomis [8]–[10]. Tokiu atveju gaunamas didesnis dalelių siekis medžiagoje [11] bei sufokusuotas dalelių pluoštas. Kanaliuojančios dalelės efektyviau sąveikauja su defektais ar priemaišomis, kurie yra arčiau kristalinių kanalų centrų. Jonų pluoštelių analizės metodika dalelių kanaliavimo geometrijoje leidžia tirti kristalinių gardelių kokybę (defektų koncentraciją ir pasiskirstymą), jonų implantacijos sukurtų pažaidų bei implantuotų jonų profilius, gardelės priemaišų pasiskirstymą, defektų anihilacijos ir kitus procesus [5], [6], [12]–[15]. Priešingai nei amorfinėse medžiagose, kristaluose kanaliuojančių dalelių elektroniniai energijos nuostoliai didžiąja dalimi priklauso nuo lokalsios elektronų koncentracijos [16], todėl yra ypatingai jautrūs dalelių pluoštelio fokusavimui [17], [18]. Kai dalelių pluoštelis lygiagretus

kristalinei ašiai, pasiekiamas didžiausias kanaliuojančių dalelių, arba kanaliavimo efektyvumas – tikimybė, kad sklindant bandinyje jonai patyrė tik mažo kampo susidūrimus ir energijos nuostoliai buvo sąlyginai maži. Didėjant kampui tarp pluoštelio ir kristalinės ašies, dalelės sklinda arčiau atominių ašių ir didesnės lokalios elektronų koncentracijos aplinkoje, todėl didėja energijos nuostoliai ir kanaliavimo efektyvumas mažėja.

Kanaliavimo procesas gali būti vertinamas analitiškai [19] arba remiantis skaitiniu modeliavimu. Modernios skaitinio modeliavimo procedūros atliekamos naudojantis molekulių dinamikos (angl. *Molecular Dynamics*, MD) [20], [21] arba binarinių susidūrimų aproksimacijos [22]–[24] metodikomis. Molekulių dinamikos skaitiniai modeliavimai yra labiau tikslūs bei detalūs, kadangi sprendžiamos judėjimo lygtys visai sąveikaujančių dalelių sistemai, tačiau tai yra skaitiškai sudėtingas uždavinys ir dažniausiai tokia metodika naudojama su mažos energijos dalelėmis (< 1 MeV). Didelės energijos dalelėms yra tikslingiau naudoti binarinių susidūrimų aproksimacijos metodą, nes vertinama sąveika tik tarp dviejų sąveikaujančių dalelių vienu metu, todėl skaičiavimai tampa žymiai mažiau sudėtingi. Pagrindiniai atgalinės sklaidos spektrų skaitinio modeliavimo įrankiai yra paremti Monte Karlo binarinių susidūrimų aproksimacijos metodu, nes atgalinės sklaidos eksperimentuose dažniausiai naudojami 1 – 5 MeV energijos dalelių pluošteliai.

Viena pagrindinių problemų, su kuria susiduriama atliekant jonų pluoštelių analizę, yra eksperimentinių spektrų interpretavimas. Priešingai nei branduolinių reakcijų, ar PIXE spektroskopijose, atgalinės sklaidos atveju detektuojama dalelių energija nėra tiksliai apibrėžta ir priklauso nuo daugelio sąlygų, tokių kaip dalelių pluoštelio parametrai, tyrimo medžiaga, eksperimento geometrija, detektoriaus savybės ir kt. Esant sudėtingiems daugiasluoksniams bandiniams, spektrų interpretavimas tampa sunkiai įmanomas be tam skirto spektrų skaitinio simuliacinio ar tinkinimo (fitinimo, angl. *fitting*) įrankio. Naudojantis tokiais įrankiais galima gauti informacijos apie bandinio elementinę sudėtį, priemaišinių atomų profilį pagal atstumą, struktūrinės savybės ir kt. Šiuo metu rinkoje yra keletas populiarių tam skirtų įrankių, tokių kaip DataFurnace WiNDF [25], SIMNRA [26], WDepth [27], RUMP [28], RBX [29] ar kt., tačiau didžioji dauguma jų yra uždaro kodo ir komerciniai. Įrankių pasirinkimas dar labiau sumažėja, kai reikia interpretuoti dalelių spektrus, gautus kanaliavimo geometrijoje. Labiausiai populiarūs tam skirti įrankiai yra FLUX7 [11], McChasy2 [30], ScatGUI [31], RBSADEC [32], DICADA [33] ir kt. Didžioji dalis programinių paketų yra uždaro kodo, o atviro kodo įrankiai

yra nebeplaikomi, todėl atsiranda sunkumų norint modifikuoti ir tobulinti juos.

Siekiant išspręsti šią problemą, šio darbo metu buvo kuriamas atviro kodo modelis atgalinės sklaidos spektrams skaitiškai modeliuoti. Pirminė modelio versija buvo skirta atgalinės sklaidos spektrų modeliavimui nuo amorfinių medžiagų, tačiau vėliau buvo pritaikyta ir kristalinėms medžiagoms kanaliavimo geometrijoje. Tikslui pasiekti buvo pasirinktas GEANT4 atviro kodo programinis paketas [34]. Šis paketas yra nuolat atnaujinamas įvairių sričių specialistų – pridėdami nauji ar modifikuojami esami fizikiniai modeliai, reakcijų ir sąveikų skerspjūvių duomenų bazės, dalelių stabdomųjų gebų bibliotekos ir kt., todėl atgalinės sklaidos modelis gali būti lengvai atnaujinamas atsižvelgus į atnaujintus fizikinius procesus ar stabdomųjų gebų bibliotekas.

Darbo tikslas ir uždaviniai

Šio darbo tikslas buvo sukurti skaitinį jonų pluoštelių atgalinės sklaidos (RBS) modelį, kuris galėtų skaitiškai modeliuoti ir padėti interpretuoti atgalinės sklaidos spektrus dalelių kanaliavimo sąlygomis, leidžiant laisvai keisti fizikinių procesų parametrus ir naudoti naujausias ir tinkamiausias eksperimentinių duomenų bibliotekas. Tikslui pasiekti buvo suformuoti šie uždaviniai:

1. Sukurti atgalinės sklaidos skaitinį modelį, skirtą amorfinėms medžiagoms, nustatyti pagrindinius jo trūkumus ir apribojimus, validuoti modelį atsižvelgiant į eksperimentinius rezultatus ir palyginti su kitais komerciniais uždaro kodo įrankiais gautais rezultatais.
2. Įvertinti originalaus dalelių kanaliavimo modelio GEANT4 programinio paketo aplinkoje galimybes, atlikti būtinus pakeitimus ir validuoti kanaliuojančių dalelių energijos nuostolius remiantis eksperimentiniais rezultatais.
3. Sukurti lengvųjų dalelių atgalinės sklaidos spektrų skaitinį modelį, kuris leistų gauti spektrus dalelėms kanaliuojant, ir jį validuoti remiantis eksperimentiniais rezultatais.

Asmeninis indėlis

Disertacija rengta 2017 – 2023 m. Fizinių ir technologijos mokslų centre (FTMC), Branduolinių tyrimų skyriuje. Magistro studijų metu doktorantas

įgavo patirties naudojantis atviro kodo C++ kalba parašytu programiniu paketu GEANT4. Tuo metu autorius skaitiškai modeliavo branduolinio reaktoriaus neutronų sukuriamų taškinių defektų sukūrimo spartą reaktoriaus grafito medžiagoje [35]. Sukaupia patirtis ir žinios leido autoriui doktorantūros studijų metu sukurti teorinį atgalinės dalelių sklaidos modelį, kuris programiniame pakete iki šiol neegzistavo. Visas skaitinio modeliavimo algoritmas ir reikalingi žingsniai, o taip pat programinis kodas buvo sukurti doktorantūros studijų metu. Antrasis darbo uždavinys buvo susijęs su originaliu dalelių kanaliavimo modeliu, kuris buvo sukurtas ir validuotas kitų autorių. Disertacijos autorius įvertino modelio galimybės bei pateikė reikšmingus pataisymus ir patobulinimus. Kanaliuojančių dalelių atgalinės sklaidos spektrų skaitinis modelis taip pat yra visiškai naujovė GEANT4 programiniame pakete. Didžioji dauguma eksperimentinių rezultatų yra kitų autorių nuopelnas, tačiau visi skaitinio modelio rezultatai yra disertacijos autoriaus. Disertacijos autorius taip pat atliko dalį atgalinės sklaidos nuo amorfinių medžiagų matavimų ir spektrų interpretavimų. Disertacijos autoriaus parašytas skaitinis modelis GEANT4 programinio paketo aplinkoje yra atviro prieigos ir laisvai pasiekiamas nuorodomis, pateiktomis disertacijos pabaigoje. Disertacijoje pristatomi modelių pakeitimai detalizuojami 3 pagrindinėse publikacijose.

Darbo naujumas

Šio darbo metu buvo sukurti 2 nauji atviro kodo įrankiai dalelių Rezerfordo atgalinės sklaidos spektrų skaitiniam modeliavimui: pirmasis skirtas amorfinėms medžiagoms, o antrasis – kristalinėms medžiagoms atsižvelgus į dalelių kanaliavimą. Atgalinės sklaidos nuo amorfinių medžiagų modelis buvo palygintas su eksperimentiniais protonų, helio ir ličio jonų atgalinės sklaidos spektrais, taip pat komercinių įrankių rezultatais. Gautas labai geras atitikimas.

Darbo metu nustatytos pagrindinės originalaus dalelių kanaliavimo modelio GEANT4 aplinkoje problemos bei pasiūlyti reikšmingi modelio pataisymai. Modelis patikrintas vertinant 1 – 20 MeV energijos dalelių kanaliavimo procesą silicio, galio arsenido ir germanio kristaluose. Darbe pateikti dalelių stabdomųjų gebų palyginimai su eksperimentinėmis vertėmis, pateikiami kristalinių potencialų ir kanaliuojančių dalelių energijos priklausomybės nuo bandinio temperatūros. Darbo metu taip pat įvertinti teorinio dalelių kanaliavimo modelio apribojimai, įtaka rezultatams naudojant skirtingus dalelių sąveikos atstumo apribojimus.

Darbo metu sukurtas dalelių atgalinės sklaidos skaitinio modeliavimo įrankis, skirtas naudoti kristalinėms medžiagoms dalelių kanaliavimo geometrijoje. Jis buvo validuotas atsižvelgiant į eksperimentinius spektrus. Darbe pateiktos spektrų priklausomybės nuo dalelių pluošto fokonavimo lygio. Sukurtas teorinis modelis yra svarbus tolimesniems dalelių kanaliavimo teoriniams tyrimams 1 – 20 MeV energijų intervale, taip pat tinkamų eksperimentinių sąlygų įvertinimui prieš atliekant praktinius eksperimentus.

Disertacijos išdėstymas

Šią disertaciją sudaro keturios pagrindinės dalys: literatūros apžvalga, jonų Rezerfordo atgalinės sklaidos nuo amorfinių medžiagų modelis, dalelių kanaliavimo modelis kristalinėse medžiagose ir atgalinės sklaidos kanaliavimo geometrijoje modelis.

Pirmoje dalyje trumpai apžvelgiama problematika, kanaliavimo proceso teorija, pagrindinės skaičiavimų metodikos.

Antroje dalyje aprašomas sukurtas dalelių atgalinės sklaidos nuo amorfinių medžiagų modelis, apžvelgiami pagrindiniai skaičiavimų ypatumai, skaitinio modeliavimo rezultatai bei pagrindinės išvagos.

Trečioje dalyje apžvelgiamas originalus dalelių kanaliavimo modelis GEANT4 aplinkoje, trumpai pademonstruojami trūkumai, aprašomi siūlomi pakeitimai ir validuojami dalelių energijos nuostoliai pagal eksperimentines vertes.

Ketvirtojoje dalyje aprašomas dalelių atgalinės sklaidos modelis, skirtas naudoti kanaliavimo geometrijoje. Apžvelgiami modelio ypatumai, įvertinamas kanaliavimo atgalinės sklaidos spektrų jautrumas dalelių parametrui. Atliekamas teorinių spektrų validavimas pagal eksperimentinius spektrus.

Disertacija baigiama išvadomis, santrauka ir literatūros sąrašu.

Ginamieji teiginiai

1. Labiausiai eksperimentines sąlygas atitinkančių ličio jonų stabdomųjų gebų bibliotekų naudojimas leidžia geresniu nei 10 % nuokrypiu įvertinti $\text{HfO}_2/\text{SiO}_2$ medžiagos sluoksnių storių pasiskirstymą modeliuojant atgalinės sklaidos spektrus.
2. Protonams kanaliuojant kristaluose su dalelių poveikiu nesusijusi didėjanti bandinio temperatūra lemia didėjančius energijos nuostolius ir

mažėjančią kanaliuojančių dalelių išėigą – 2 MeV energijos protonams išilgai <100> ašies silicyje didžiausią energiją turinčių jonų kiekis sumažėja beveik 2 kartus, kai temperatūra pakyla nuo 100 K iki 1000 K.

3. Originalus dalelių kanaliavimo modelis GEANT4 aplinkoje neteisingai vertina kanaliuojančių dalelių energijos nuostolius, o modelį modifikavus energijos nuostoliai 1 – 20 MeV energijų intervale silicio, germanio ir galio arsenido kristaluose įvertinami geresniu nei 20 % nuokrypiu nuo eksperimentinių verčių, kurį riboja stabdomųjų gebug bibliotekų patikimumas.
4. Jonų atgalinės sklaidos spektrams kanaliavimo geometrijoje didžiausią įtaką turi bandinio temperatūra ir pluoštelio kampinė skėstis, tačiau spektrų matavimas žemesnėje nei kambario temperatūroje prasmingas tik esant geram pluoštelio kolimavimui – protonams iki 3 MeV energijos dalelių pluoštelio skėstis neturi viršyti $0,1^\circ$.

Publikacijos

Publikacijos disertacijos tema:

1. **D. Lingis**, M. Gaspariūnas, V. Kovalevskij, A. Plukis, V. Remeikis, „A model to simulate large angle Rutherford backscattering spectra in GEANT4”, Computer Physics Communications Vol. 271, (2022), <https://doi:10.1016/j.cpc.2021.108187>. **IF: 6.3, 2022 Q1**
2. **D. Lingis**, M. Gaspariūnas, A. Plukis, V. Remeikis, “Improvements and validation of particle channeling model in GEANT4”, Nucl. Instruments Methods Phys. Res Sect. B Beam Interact. with Mater. Atoms, Vol. 525, p. 1–12, (2022), <https://doi:10.1016/j.nimb.2022.05.007>. **IF: 1.3, 2022 Q2.**
3. **D. Lingis**, M. Gaspariūnas, V. Kovalevskij, A. Plukis, V. Remeikis, „Simulation of large angle Rutherford backscattering spectra of channeled protons in GEANT4“, Nucl. Instruments Methods Phys. Res Sect. B Beam Interact. with Mater. Atoms., Vol. 543, 165091 (2023), <https://doi.org/10.1016/j.nimb.2023.165091>. **IF: 1.3, 2022 Q2.**
4. **D. Lingis**, M. Gaspariūnas, V. Kovalevskij, A. Plukis, V. Remeikis, „Numerical simulation of backscattering spectra in GEANT4 toolkit“, Lietuvos Fizikos Žurnalas. **Priimta spausdinimui.**

Kitos publikacijos:

1. V. Remeikis, E. Lagzdina, A. Garbaras, A. Gudelis, J. Garankin, R. Plukienė, L. Juodis, G. Duškesas, **D. Lingis**, V. Abdulajev, A. Plukis, „Rapid analysis method for the determination of ^{14}C specific activity in irradiated graphite“, PloS ONE, vol. 13. No. 1., 2018, <https://doi.org/10.1371/journal.pone.0191677>.
2. **D. Lingis**, E. Lagzdina, A. Plukis, R. Plukienė, and V. Remeikis, „Evaluation of the primary displacement damage in the neutron irradiated RBMK-1500 graphite“, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B, Vol. 436, no. May, pp. 9–17, 2018, <https://doi.org/10.1016/j.nimb.2018.08.038>.
3. E. Lagzdina, **D. Lingis**, A. Plukis, R. Plukienė, M. Gaspariūnas, I. Matulaitienė, V. Kovalevskij, G. Niaura, V. Remeikis, „Structural investigation of RBMK nuclear graphite modified by $^{12}\text{C}^+$ ion implantation and thermal treatment“, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B, Vol. 444 (2019), p. 23–32, <https://doi.org/10.1016/j.nimb.2019.01.049>.
4. E. Lagzdina, **D. Lingis**, A. Plukis, R. Plukiene, D. Germanas, A. Garbaras, J. Garankin, A. Gudelis, I. Ignatjev, G. Niaura, S. Krutovcov, V. Remeikis, „Structural and radiological characterization of irradiated RBMK–1500 reactor graphite“, Nuclear Engineering and Technology, Vol. 54, Iss.1 (2022), <https://doi.org/10.1016/j.net.2021.07.039>.
5. I. Garbarienė, J. Pauraitė, D. Pashneva, A. Minderytė, K. Sarka, V. Dudoitis, L. Davulienė, M. Gaspariūnas, V. Kovalevskij, **D. Lingis**, L. Bučinskas, J. Šapolaitė, Ž. Ežerinskis, G. Mainelis, J. Ovadnevaitė, S. Kecorius, K. Plauškaitė-Šukienė, S. Byčenkienė, „Indoor-outdoor relationship of submicron particulate matter in mechanically ventilated building: Chemical composition, sources and infiltration factor“, Building and Environment, Vol. 222 (2022), <https://doi.org/10.1016/j.buildenv.2022.109429>
6. E. Lagzdina, **D. Lingis**, Y. Pipon, R. Plukienė, I. Ignatjev, A. Plukis, N. Moncoffre, G. Niaura, V. Remeikis, „Application of ion implantation as a tool to study neutron induced morphological changes in HOPG and RBMK-1500 reactor graphite“, Nucl. Instruments Methods Phys. Res

Pranešimai konferencijose

1. 25th International Conference on the Application of Accelerators in Research and Industry (CAARI 2018), rugpjūčio 12–17, 2018, Teksasas, JAV, V. Kovalevskij, M. Gaspariūnas, **D. Lingis**, N. Rusteika, I. Kašalynas, A. Plukis, V. Remeikis; „Implementation of high energy ions implantation for the adjustments of properties of complex semiconductor structures“, standinis pranešimas
2. Joint ICTP–IAEA Advanced School on Ion Beam Driven Materials Engineering: Accelerators for a New Technology Era, spalio 1–5, 2018, Trieste, Italija, **D. Lingis**, E. Lagzdina, A. Plukis, R. Plukienė, M. Gaspariūnas, I. Matulaitienė, V. Kovalevskij, G. Niaura, V. Remeikis; „Investigation of the graphite structure after modification by $^{12}\text{C}^+$ ion implantation and thermal treatment“, žodinis pranešimas.
3. Int. Conf. on High Temperature Reactor Technology HTR2018, October 8–10, 2018, Warsaw, Poland. **D. Lingis**, E. Lagzdina, R. Plukienė, L. Juodis, A. Plukis, V. Remeikis, Modelling of graphite properties for GT-MHR loaded with Pu fuel, žodinis pranešimas.
4. 8th CPST Conference of Young Scientists and Doctoral Students FizTech2018, spalio 17–18, 2018, Vilnius, Lietuva. E. Lagzdina, **D. Lingis**, A. Plukis, R. Plukienė, M. Gaspariūnas, I. Matulaitienė, V. Kovalevskij, G. Niaura, V. Remeikis, „ $^{12}\text{C}^+$ jonais implantuoto bei termiškai apdoroto RBMK grafito morfologijos tyrimas Ramano spektroskopijos metodu“ ($^{12}\text{C}^+$ ion implanted and thermally treated RBMK graphite structure investigation by Raman spectroscopy), žodinis pranešimas.
5. 13th European Conference on Accelerators in Applied Research and Technology ECAART–13, gegužės 5–10, 2019, Split, Kroatija, V. Kovalevskij, **D. Lingis**, E. Lagzdina, A. Plukis, R. Plukienė, V. Jasulaitiene, G. Niaura, V. Remeikis. „Structural investigation of RBMK nuclear graphite modified by ion implantation“, standinis pranešimas.

6. LNFK43, spalio 3–5, 2019, Kaunas, Lietuva, **D. Lingis**, M. Gaspariūnas, V. Kovalevskij, A. Plukis, V. Remeikis, „Jonų pluoštelių kanaliavimo teorinis modeliavimas“, standinis pranešimas.
7. FizTech2019, spalio 24, 2019, Vilnius, Lietuva, **D. Lingis**, E. Lagzdina, R. Plukienė, A. Plukis, V. Kovalevskij, I. Ignatjev, G. Niaura, V. Remeikis; „Jonų implantacijos metodo taikymas vertinant neutronų apšvitos poveikį RBMK reaktoriaus grafito morfologijai“, žodinis pranešimas.
8. CYSENI2021, gegužės 24–28, Kaunas, Lietuva, **D. Lingis**, V. Kovalevskij, A. Plukis, V. Remeikis; „Simulation of charged particle channeling in crystals“, žodinis pranešimas.
9. FizTech2021, spalio 20, 2021, Vilnius, Lietuva, **D. Lingis**, V. Kovalevskij, A. Plukis, V. Remeikis; „Protonų kanaliavimo silicio kristale skaitinis modeliavimas GEANT4 programiniu paketu“, žodinis pranešimas.

Darbo metu sukurti skaitiniai modeliai

Disertacijos autoriaus sukurtas atgalinės sklaidos spektrų modelio GEANT4 aplinkoje programinis kodas yra laisvai prieinamas internete:

- Amorfinių medžiagų atgalinės sklaidos modelis https://github.com/dlingis/G4_RBS_simulator
- Modifikuotas dalelių kanaliavimo modelis GEANT4 aplinkoje https://github.com/dlingis/G4_MC_IonBeamChanneling
- Atgalinės sklaidos modelis dalelių kanaliavimo geometrijoje https://github.com/dlingis/G4_Channeling_RBS

1. Literatūros apžvalga

1.1. Elektringųjų dalelių sąveika su medžiaga

Elektringosios dalelės, sąveikaudamos su medžiaga, praranda energiją keliais būdais: energijos nuostoliai dėl jonizacijos, stabdomoji spinduliuotė bei branduolinės sąveikos. Stabdomoji spinduliuotė (vok. *Bremsstrahlung*) yra atvirksčiai proporcinga krintančiosios dalelės masės kvadratui, todėl žymūs energijos nuostoliai pastebimi lengvesnėms dalelėms (pvz., elektronams), o lengviesiems jonams (pvz., protonai ir alfa dalelės) stabdomieji energijos nuostoliai sąlyginai maži. Didelės energijos dalelėms sąveikaujant su medžiaga, dominuojantis energijos nuostolių mechanizmas yra jonizaciniai nuostoliai. Šiuo atveju krintančioji dalelė savo elektriniu lauku veikia medžiagos elektronus suteikiant jiems energijos. Vidutinius energijos nuostolius kelio vienetui apibrėžia *Bethe–Bloch* sąryšis [16]:

$$-\frac{dE}{dx} = \frac{4\pi n Z_1^2 e^4}{m_e v^2} \left[\ln \frac{2m_e c^2 \beta^2 \gamma^2}{I} - \beta^2 - \frac{C}{Z_2} - \frac{\delta}{2} \right] \quad (1)$$
$$\beta = \frac{v}{c}; \quad \gamma = \left(1 - \frac{1}{\beta^2}\right)$$

čia Z_1 ir Z_2 – krintančios dalelės ir taikinio branduolio krūvio skaičiai, e – elementarusis krūvis, m_e – elektrono rimties masė, v – dalelės greitis, I – medžiagos vidutinė jonizacijos konstanta, C – elektronų apvalkalo korekcijos faktorius, δ – tankio efekto funkcijos korekcija, n – elektronų koncentracija, o c – šviesos greitis. Sąryšyje kartu su stipria energijos nuostolių priklausomybe nuo dalelės greičio (energijos), taip pat yra stebima priklausomybė nuo elektronų tankio. Amorfinėse medžiagose elektronų tankis yra santykinai vienodas visomis kryptimis, tačiau jis žymiai skiriasi kristalinėse medžiagose, todėl dalelėms sąveikaujant su kristalinėmis gardelėmis energijos nuostoliai dažnai skiriasi nuo nuostolių amorfinėse medžiagose.

Branduolinės sąveikos metu gali žymiai pakisti krintančiosios dalelės energija ir judėjimo kryptis. Egzistuoja tamprioji sklaida, kurios metu bendra sistemos energija išlieka nepakitusi, ir netamprioji sklaida, kurios metu dalis kinetinės energijos išnaudojama atomų sužadanimui. Vienas iš pagrindinių tampriosios sklaidos mechanizmų yra Rezerfordo sklaida, kurios metu krintančioji dalelė sąveikauja tik elektrostatiškai. Rezerfordo sklaida

pagrįstas vienas iš esminių medžiagos analizės metodų – Rezerfordo atgalinės sklaidos spektroskopija.

1.2. Rezerfordo atgalinės sklaidos spektroskopija

Rezerfordo atgalinės sklaidos spektroskopija yra vienas iš populiariausių ir informatyviausių jonų pluoštelių medžiagos analizės metodų. Ši spektroskopija remiasi lengvųjų dalelių elastine sklaida nuo taikinio atomų. Krintančiosios dalelės energija po sklaidos įvykio priklauso nuo taikinio atomo masės:

$$E_1 = KE_0 = \left(\frac{\cos(\theta) + \sqrt{\left(\frac{M_2}{M_1}\right)^2 - \sin^2(\theta)}}{1 + \frac{M_2}{M_1}} \right)^2 E_0, \quad (2)$$

čia E_0 ir E_1 yra dalelės energija prieš ir po sklaidos įvykio, K yra kinematinis faktorius, M_2 ir M_1 yra taikinio atomo ir krintančiosios dalelės masės skaičiai, o θ – sklaidos kampas. Ši išraiška rodo, kad tam tikros M_1 masės dalelės energija E_1 po sklaidos kampu θ priklauso praktiškai tik nuo taikinio atomo masės M_2 . Ši išraiška dalinai apibrėžia energijos, o tuo pačiu ir masės rezoliuciją [36]:

$$\Delta E_1 = E_0 \frac{dK}{dM_2} \Delta M_2 \rightarrow \delta M_2 = \frac{\delta E}{E_0} \left(\frac{dK}{dM_2} \right)^{-1}. \quad (3)$$

Pirmoji lygybė rodo išsklaidytų dalelių energijos skirtumą ΔE_1 , kai sklaida vyksta nuo taikinio atomų, kurių masės skirtumas yra ΔM_2 . Jeigu ΔE_1 prilyginame δE , t.y. mažiausiam energijos skirtumui, kurį galima atskirti eksperimentiškai, gaunama taikinio atomų masės rezoliucija δM_2 . Ši išraiška rodo, kad taikinio atomų masės rezoliucija δM_2 : a) mažėja didėjant krintančiosios dalelės energijai E_0 ; b) mažėja didėjant taikinio elementų masei M_2 ; c) lengvųjų elementų juostos gali būti užgožtos sunkesnių elementų juostų esant storam bandiniui. Mažiausia eksperimentiškai atskiriama energija paprastai yra detektoriaus energinė skyra, jeigu dalelė išsklaidoma paviršiuje, o vykstant sklaidai iš gilesnių sluoksnių mažiausią atskiriamą energiją riboja energinė sklaida.

Rezerfordo atgalinės sklaidos spektrą sudaro detektuotų dalelių energinė histograma. Tam tikros energijos dalelių atgalinės sklaidos intensyvumas ΔY iš plono Δt storio atomų sluoksnio yra:

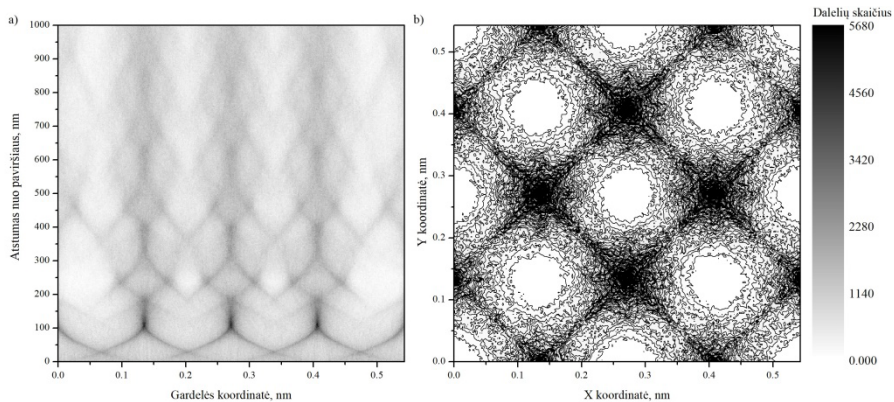
$$\Delta Y = \Omega n N \Delta t \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{LAB}, \quad (4)$$

čia N – medžiagos atomų tankis (cm^{-3}), Ω – detektoriaus erdvinis kampas, $d\sigma/d\Omega$ yra diferencialinis sklaidos skerspjūvis laboratorijos atskaitos sistemoje, o n yra santykinė branduolių koncentracija (angl. *normalized nuclei density*). Santykinė branduolių koncentracija rodo branduolių koncentracijos santykį kanaliuojančios dalelės pozicijoje lyginant su amorfiniu bandiniu. Amorfiniams bandiniams šis daugiklis lygus 1, tačiau kanaliuojančiai dalelei šis daugiklis gali varijuoti per 10 eilių, kai santykis yra labai mažas dalelei esant kristaliniame kanale ir labai didelis, kai dalelė yra arti atomų ašies. Kai taikinsy daugiaelementis, atgalinės sklaidos išėiga skaičiuojama kiekvienai taikinio atomų – krintančiosios dalelės porai ir sumuojama. Tokiu būdu gaunamas pilnutis atgalinės sklaidos spektras.

1.3. Elektringųjų dalelių kanaliavimas

Dalelių pluoštėlio kanaliavimo reiškinys buvo atsitiktinai atrastas dvidešimtojo amžiaus septintajame dešimtmetyje, stebint netikėtą dalelių elgseną kristalinėse medžiagose [37], [38]. Eksperimentiškai stebėtas padidėjęs jonų implantacijos gylis vėliau buvo teoriškai atskleistas skaitiškai modeliuojant daleles, krintančias beveik lygiagrečiai pagrindinėms ašinėms (angl. *axial*) ir plokštuminėms (angl. *planar*) kristalografinėms kryptims [39]. Energingsoms dalelėms sklindant kristalinėje gardelėje jų trajektoriją sudaro nuoseklių binarinių susidūrimų su medžiagos atomais seka. Kai pluoštėlis praktiškai lygiagretus ašinėms ar plokštuminėms kristalografinėms ašims, kanaliuojanti dalelė patiria eilę koreliuotų (mažo energijos ir sklidimo kampo pokyčio) susidūrimų, dėl kurių dalelės krypties pokyčio kampas $\Delta\varphi$ yra santykinai mažas lyginant su bendru trajektorijos pokyčiu. Tokiu atveju gaunamas švelnus dalelės trajektorijos pakeitimas, kai dalelių kritimo kampas su kristalografine ašimi yra lygus kampui, kuriuo dalelė yra nukreipiama nuo atomų grandinėls po susidūrimo. Visapusė dalelių kanaliavimo teorija, sukurta *Lindhard* [7], remiasi tuo, kad pavienių kristalo atomų potencialas aproksimuojamas atomų grandinėls arba atomų plokštumos tėtiniu potencialu atitinkamose atomų pozicijose. Tokia aproksimacija galima tik tada, kai dalelių sklaidos kampai yra sąlyginai maži, egzistuoja sklaidos įvykių koreliacija ir gardelė traktuojama kaip ideali. Remiantis tėtinio potencialo aproksimacija, dalelės judėjimas apribojimas dvimate potencine duobe [7]. Didelės energijos lygiagrečiai krintanti dalelė gali būti įkalinama tokioje duobėje ir jos trajektorijai

svyruojant tarp aukštų atominių potencialų. Tokiu būdu kristalinėse medžiagose gaunami kanalai (angl. *channel*), kuriuose sklindant dalelėms vyksta dalelių kanaliavimo procesas. Dalelėms kanaliuojant jos yra fokusuojamos kanaluose ir vyksta osciliacija tarp atomų grandinėlių, kaip pavaizduota 1 pav.. Šiuo atveju pateiktas darbo metu modifikuoto skaitinio dalelių kanaliavimo modelio procesas: 2 MeV energijos protonų, kanaliuojančių išilgai $\langle 100 \rangle$ Si ašies, dalelių pasiskirstymas. Vertinant dalelių pasiskirstymo priklausomybę nuo atstumo nuo paviršiaus, stebimas pirminis pluoštelio sufokusavimas ties ~ 80 nm (žr. 1 pav. a) ir periodinės osciliacijos kas ~ 240 nm. Remiantis dalelių dvimačiu pasiskirstymu (žr. 1 pav. b) pastebima, kad dalelės daugiausia laiko praleidžia atviruose kanaluose tarp atominių pozicijų. Pozicijos, kuriose mažiausiai laiko praleidžia dalelės atitinka atomų pozicijas ir didžiausio potencialo vertes (žr. 18 pav. ir 19 pav.).



1 pav. GEANT4 modeliu gauti išilgai $\langle 100 \rangle$ Si ašies kanaliuojančių protonų erdviniai pasiskirstymai: a) pagal atstumą nuo paviršiaus, b) dvimatis pasiskirstymas gardelėje nuo paviršiaus iki 500 nm gylio.

Kristalinių kanalų centruose lokali elektronų koncentracija yra žymiai mažesnė lyginant su koncentracija arčiau atomų pozicijų, o kartu ir lyginant su vidutine koncentracija amorfinėse medžiagose. Kadangi jonizaciniai dalelių nuostoliai daugiausia priklauso nuo elektronų koncentracijos (žr. formulę (1)), dalelei kanaliuojant gaunami mažesni energijos nuostoliai lyginant su amorfinėmis medžiagomis. Dėl mažesnių energijos nuostolių ir padidėjusio dalelių siekio galimi įvairūs kanaliavimo pritaikymo būdai, tokie kaip pluoštelio kreipimas [40], dalinimas ir fokusavimas [41], taip pat padažnėjusių specifinių branduolinių reakcijų stebėjimas [42] ir kt. efektai. Viena iš svarbesnių kanaliavimo pritaikymo sričių yra galimybė stebėti kristalinių defektų ir priemaišų kūrimosi ir evoliucijos procesus [12], [43].

1.4. Kanaliavimo sąlygos

Pagrindinis šiuo metu naudojamas teorinis kanaliavimo modelis yra aprašytas *Lindhard* [7]. Remiantis juo, jei dalelės judėjimas medžiagoje yra valdomas koreliuotų susidūrimų su atomų grandinėlių atomais, atomų poveikis gali būti aproksimuojamas tęstiniu atomų grandinės potencialu. Tokiu atveju, atsižvelgiant į visų atomų potencialus išilgai atomų grandinėlių, potencialo išraiška:

$$U(r) = \int_{-d/2}^{d/2} V_c(\sqrt{z^2 + r^2}) dz, \quad (5)$$

čia V_c yra kristalo potencialas, z yra atstumas išilgai atomų grandinėlių, d – atstumas tarp kaimyninių atomų, o r yra radialinis atstumas tarp dalelės ir atomų grandinėlių. Į šią lygtį įstačius *Thomas–Fermi* potencialo *Moliere* aproksimaciją, gaunamas ašinis tęstinis potencialas statinei gardelei [44]:

$$U_a(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{d} \ln([Ca/r]^2 + 1), \quad (6)$$

čia $C^2 = 3$, Z_1 ir Z_2 yra dalelės ir atomo krūvio skaičiai, e – elementarusis krūvis, r – atstumas nuo atomų grandinėlių, o a yra ekranavimo atstumas. Atsižvelgus į sklaidą mažais kampais, kanaliuojančios dalelės kampai prieš sklaidą ir po jos yra apytiksliai lygūs. Tokiu atveju gaunamas skersinės (statmenai atomų grandinėlių ašiai) energijos E_T išsaugojimas:

$$E_T = \frac{p_x^2 + p_y^2}{2M} + U(r) = E\Phi^2 + U(r), \quad (7)$$

čia $U(r)$ yra kristalo potencialas, M yra krintančiosios dalelės masė, p_i yra dalelės momentas i – taja kryptimi, Φ yra kritimo kampas, o E yra dalelės kinetinės energijos komponentė statmenai dalelių sklaidimo (z) ašiai. Kai dalelės skersinė energija lygi skersinei energijai artimiausio priartėjimo (angl. *closest approach*) atstume r_{min} , gaunamas kritinis kanaliavimo kampas Ψ_c :

$$\Psi_c = \sqrt{\frac{U(r_{min})}{E}}. \quad (8)$$

Tokiu būdu gaunamas maksimalus ribinis kampas, kuriam esant dalelė dar gali būti kanaliuojanti. Statinėje gardelėje mažiausio priartėjimo atstumas r_{min} lygus *Thomas–Fermi* ekranavimo spinduliui a_{TF} :

$$a_{TF} = 0.885 a_B \left(Z_1^{1/2} + Z_2^{1/2} \right)^{-2/3} \quad (9)$$

čia Z_1 ir Z_2 yra dalelės ir taikinio atomo krūvio skaičiai, o a_B yra *Bohr* spindulys. Kai gardelė ne statinė, dėl virpesių atomų pozicijos tampa mažiau apibrėžtos, todėl kinta mažiausio priartėjimo atstumas. Atstumą tokiu atveju riboja ne vien *Thomas–Fermi* ekranavimo spindulys, bet ir atomų virpesių amplitudė dėl temperatūros (angl. *thermal vibrational amplitude*) ρ :

$$r_{min} \approx \sqrt{a_{TF}^2 + \rho^2} \quad (10)$$

Remiantis šia išraiška, tęstinio potencialo lygtimi (5) ir kritinio kampo lygtimi (8), gaunama kritinio kampo išraiška virpančiai gardelei:

$$\psi_c(\rho) = \frac{\psi_1}{\sqrt{2}} \left\{ \ln \left(\left[\frac{Ca}{r} \right]^2 + 1 \right) \right\}^{1/2}, \quad (11)$$

čia ψ_1 yra istoriškai naudojama grubi kritinio kampo aproksimacija:

$$\psi_1 = \sqrt{\frac{2Z_1 Z_2 e^2}{Ed}}. \quad (12)$$

Gauta, kad kritinis kampas, kurio neviršijus gali vykti dalelių kanaliavimas, apibrėžiamas (11) išraiška. Atsižvelgus į (6) ir (10) lygtis gaunama, kad didėjant temperatūrai (o tuo pačiu ir virpesių amplitudei), mažėja maksimali potencialo vertė, o tuo pačiu ir kritinis kampas. Jeigu kanaliavimo sąlyga vertinama iš energijos perspektyvos, tada kanaliavimas gali vykti kai:

$$E\phi^2 < U_{max} \quad (13)$$

t.y. tol, kol dalelės kinetinės energijos komponentė statmenai sklidimo ašiai yra mažesnė už maksimalią kristalo potencialo vertę. Maksimali kristalinio potencialo vertė apribojama mažiausio priartėjimo atstumo, kuris statinei gardelei lygus *Thomas–Fermi* ekranavimo atstumui, o dėl šiluminių virpesių atstumas apibrėžiamas (10) išraiška.

2. Atgalinės sklaidos spektrų nuo amorfinių medžiagų skaitinis modelis

Šioje dalyje detalizuojamas atgalinės sklaidos nuo amorfinių medžiagų spektrų skaitinis modeliavimas *GEANT4* programinio paketo aplinkoje –

trumpai apžvelgiami naudoti programiniai paketai, apibrėžiamas modelio algoritmas ir pagrindiniai sąryšiai, palyginamos stabdomosios gebos ir sklaidos skerspjūviai. Rezultatų skiltyje pateikiamas teorinių ir eksperimentinių skerspjūvių palyginimas bei atgalinės sklaidos spektrų validavimas.

2.1. Darbe palyginimui naudoti papildomi programiniai paketai

2.1.1. SRIM–2013 programinis paketas

SRIM–2013 (*The Stopping and Range of Ions in Matter*) [45] yra nemokamas, plačiausiai pasaulyje naudojamas programinis paketas, skirtas dalelių judėjimo medžiagoje skaitiniam modeliavimui. SRIM naudoja binarinių susidūrimų aproksimaciją (angl. *Binary Collision Approximation, BCA*) vertinant dalelės ir atomo sąveiką. Tokiu atveju dalelių judėjimas medžiagoje traktuojamas kaip pavienių atomų ir dalelės nepriklausomų susidūrimų visuma. Pagrindinis SRIM programinio paketo privalumas yra tas, kad galima įvertinti praktiškai visų jonų – atomų taikinių sąveiką plačiame energijų diapazone. SRIM stabdomųjų gebų biblioteka paremta didelio kiekio eksperimentinių rezultatų vidurkinimu: vidutinis verčių nuokrypis nuo eksperimentinių yra geresnis nei 10 % mažos energijos sunkiesiems jonams ir geresnis nei 2 % didelės energijos lengviesiems jonams [46]. Šio tyrimo metu SRIM stabdomosios gebos bibliotekos buvo naudotos vertinant dalelių energijos nuostolius amorfinėse medžiagoje, taip pat skaitiškai modeliuojant sunkiųjų jonų atgalinės sklaidos spektrus.

2.1.2. SIMNRA ir WiNDF programiniai paketai

SIMNRA [26] ir DataFurnace WiNDF [25] yra du plačiausiai jonų pluoštelių analizėje naudojami programiniai paketai atgalinės sklaidos skaitiniam modeliavimui ir spektrų interpretavimui. Paketai plačiai paplitę dėl savo universalumo, nes leidžia skaitiškai modeliuoti ir tinkinti ne vien RBS spektrus, bet ir PIXE, ERD, NRA ir kt. spektrus. Skaičiavimų metu paketai gali atsižvelgti į paviršiaus netolygumą, medžiagos nehomogeniškumą ir kitus parametrus. Šiais paketais atliekant skaičiavimus buvo naudota SRIM–2003 stabdomųjų gebų biblioteka, *Bohr* energijos nuostolių sklaida su *Chu* korekcijomis ir SigmaCalc [47] rezonansiniai Rezerfordo atgalinės sklaidos skerspjūviai. Abejuose programiniuose paketuose buvo naudojami daugkartinės dalelių sklaidos skaičiavimo algoritmai, o WiNDF pakete papildomai buvo naudojamas ir dvigubos

sklaidos (angl. *double scattering*) modelis. Skaitinio modeliavimo eksperimentinė geometrija (pluoštelio energija, kritimo kampas, bandinio atstumas nuo detektoriaus ir kt. parametrai) buvo vienoda tarp visų paketų. Šie du komerciniai įrankiai buvo naudoti siekiant palyginti šio darbo metu sukurto GEANT4 RBS modelio atitikimą su eksperimentiniais rezultatais ir komerciniais įrankiais. Daugiau informacijos apie programinius paketus galima rasti dedikuotuose šaltiniuose ir programų vadovuose.

2.2. Rezerfordo atgalinės sklaidos modelis GEANT4 programiniame pakete

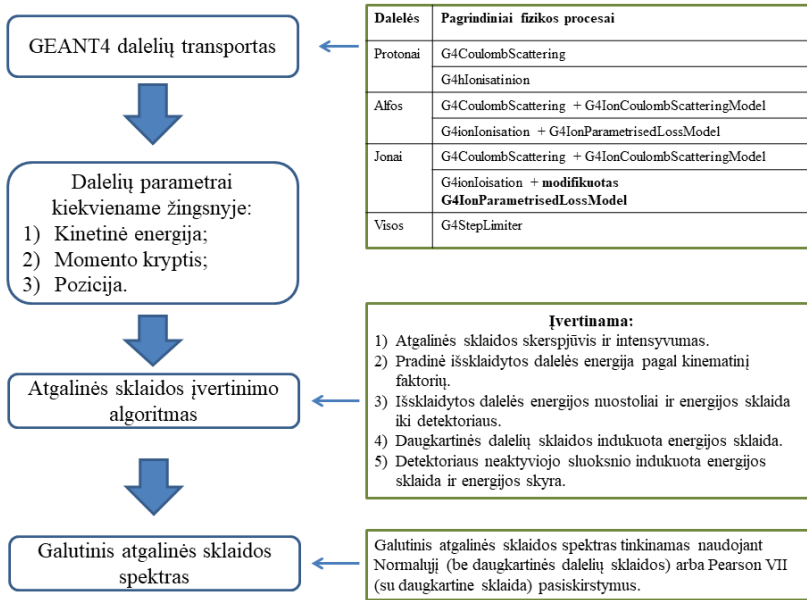
GEANT4 (GEometry ANd Tracking) yra plačiai naudojamas programinis paketas, skirtas skaitiškai modeliuoti dalelių sąveiką su medžiaga [34]. Šio įrankio populiarumą lemia tai, kad jis yra atviro kodo, parašytas naudojant objektinę C++ programavimo kalbą ir turi platų pritaikomumą: nuo didelės energijos dalelių fizikos ir branduolinių eksperimentų [48] iki kosminių [49] bei medicininių [50] eksperimentų skaitinio modeliavimo. Atviro kodo naudojimas leidžia skaitinį modeliavimą atlikti naudojant įterptus naujus fizikinius procesus, skaičiavimų algoritmus ir kita. GEANT4 paketo aplinkoje dalelės sąveika su medžiaga ir trajektorija skaitiškai modeliuojama naudojant žingsnius (angl. *step*), kuriuos galima įsivaizduoti kaip dalelės ir medžiagos sąveikos įvykius (pvz., Kuloninė sąveika). Kiekviename dalelės žingsnyje yra kviečiamas fizikinės sąveikos procesas, pagal kurį įvertinama ir modeliuojama dalelės trajektorija iki kito žingsnio (kito žingsnio pozicija, žingsnio atstumas, dalelės energijos nuostoliai per žingsnį ir kt.). Fizikiniai procesai GEANT4 pakete skirstomi į dvi kategorijas – diskretinius (pavienius, angl. *discrete*) ir tęstinius (angl. *continuous*). Diskretiniai fizikiniai procesai vertina energijos ir judesio kiekio momento pokytį žingsnyje dalelei sąveikaujant su individualiomis taikinio dalelėmis, kaip elektronas ar branduolys, o tokie procesai yra Kulono sklaida, porų kūrimas ir kt. Tęstiniai fizikiniai procesai vertina dalelės energijos ir trajektorijos pokyčius tarp žingsnių. Tokiems procesams priskiriama jonizacija (laipsniški energijos nuostoliai sąveikaujant su medžiagos elektronų debesėliu), dalelių daugkartinė sklaida (trajektorijos pokytis sąveikaujant su medžiagos elektronų ir branduolių elektriniu lauku) ir kt. Tokiu būdu GEANT4 paketas dalelių sąveiką vertina kviesdamas diskretinius fizikinius procesus kiekviename žingsnyje, o tarp žingsnių trajektorijos ir energijos pokyčiai įvertinami tęstinių fizikinių procesų. Žingsnių dydis yra parenkamas GEANT4 paketo optimizuojant skaitinio modeliavimo trukmę ir trajektorijos tikslumą. Tokiu būdu dalelės sąveika su medžiaga modeliuojama tol, kol jos energija nukrenta žemiau apibrėžtos

vertės (dalelė sustoja arba tolimesnis dalelės sekimas netikslingas), dalelė išnyksta (pvz., branduolinė reakcija) arba išlekia iš modeliujamos geometrijos (bandinio). Detalesnis dalelių trajektorijos modeliavimo ir fizikinių procesų aprašymas pateiktas šaltiniuose [51] ir [52].

Skaitiškai modeliujamų dalelių informacija (energija, kryptis ir kt.) pasiekama tik žingsnių pozicijose, o ne tarp jų. Dėl optimalaus žingsnio dydžio parinkimo dalelei sklindant ploname medžiagos sluoksnyje galimas toks atvejis, kad žingsniai bus registruojami tik sluoksniu pradžioje ir pabaigoje, o viduje sluoksniu dalelės žingsnių nebus. Tokiu atveju informacija apie dalelės parametrus sluoksniu viduryje gali būti nepasiekama. Apriboti dalelių žingsnių paketo aplinkoje galima naudojant specialią *G4StepLimiter* klasę, kurios rėmuose galima nustatyti maksimalius žingsnio dydžius individualioms dalelėms skirtingose medžiagose. Tokiu būdu dalelė priverčiama atlikti daugiau žingsnių ir galimas detalesnis dalelės energijos pasiskirstymo vertinimas sklindant per medžiagos sluoksni.

Darbo metu kiekviename dalelės žingsnyje buvo surenkama dalelės pozicijos, energijos, krypties ir kt. informacija, kuri naudota skaitiniam atgalinės sklaidos spektrų modeliavimui. Plonesniems nei 20 nm medžiagos sluoksniams didžiausias dalelės žingsnio dydis buvo apribotas iki 0,5 nm, o storesniems nei 20 nm iki 2 nm maksimalaus dydžio. Fizikinių procesų, naudojamų modelyje, detalizavimas pateiktas GEANT4 fizikos aprašymuose [53] ir šiame darbe nebus detalizuojamas išskyrus pagrindinius ypatumus. Tyrimė naudotų dalelių (protonai, alfa dalelės ir ličio jonai) sąveikai su medžiagomis buvo naudoti 2 pagrindiniai fizikiniai procesai: jonizacinių energijos nuostolių (*G4hIonisation* ir *G4ionIonisation* klasės) bei Kuloninė sklaida (*G4CoulombScattering* klasės), kuri iš esmės yra Rezerfordo sklaida. Sunkesniems jonams taip pat naudota *G4IonParametrisedLossModel* klasė, kuri skirta stabdomųjų gebų parametrizavimui pagal eksperimentinius bei teorinius rezultatus (plačiau 2.4 skyriuje).

GEANT4 atgalinės sklaidos skaitinio modeliavimo algoritmo principinė schema pateikta 2 pav.. Algoritmas remiasi dalelių transporto skaitiniu modeliavimu ir dalelių parametrų surinkimu ties kiekvienu dalelės žingsniu. Tada dalelės energija, sklidimo kryptis ir pozicija perduodama RBS skaitinio simuliacijai modeliui ir skaičiuojamas teorinis atgalinės sklaidos spektras. Šiame darbe pristatomas sukurtas atgalinės sklaidos modelis susideda iš kelių atskirų žingsnių, kurie detalizuojami žemiau pateiktuose skyriuose.



2 pav. Supaprastinta skaitinio modeliavimo schema GEANT4 aplinkoje.

2.3. Rezerfordo atgalinės sklaidos reakcijos skerspjūvio vertinimas

Rezerfordo atgalinės sklaidos skerspjūvis, kaip bus parodyta vėliau, priklauso nuo dalelės sklaidos kampo. Įprastai literatūroje ar atliekant eksperimentus, atgalinės sklaidos kampai pateikiami laboratorinės atskaitos sistemos atžvilgiu, tačiau skaičiavimus lengviau atlikti naudojant masių centro atskaitos sistemą. Teorinis sklaidos kampas laboratorijos ir masių centro atskaitos sistemose susijęs sąryšiu [45]:

$$\sin(\theta_{CM} - \theta_{LAB}) = \frac{M_1}{M_2} \sin\theta_{LAB}, \quad (14)$$

čia θ_{CM} ir θ_{LAB} yra sklaidos kampai masių centro (angl. *center of mass*, CM) ir laboratorinėje atskaitos sistemoje, o M_1 ir M_2 yra, atitinkamai, krintančiosios dalelės ir taikinio atomo masės skaičiai. Sklaidos kampas masių centro sistemos atžvilgiu tada:

$$\theta_{CM} = \arcsin\left(\frac{M_1}{M_2} \sin\theta_{LAB}\right) + \theta_{LAB}. \quad (15)$$

Sklaidos kampas priklauso nuo taikinio atomų masės, todėl skaitiniame modeliavime naudojamos medžiagos yra padalinamos į atskirus elementus su atitinkamais atomų masės ir krūvio skaičiais, bei atominiu tankiu. Tada

reakcijos skerspjūvis skaičiuojamas kiekvienai taikinio medžiagos atomų – dalelės porai. Norint įvertinti sklaidos skerspjūvį CM sistemoje, kinetinė dalelės energija laboratorinėje atskaitos sistemoje E_{LAB} turi būti perskaičiuojama į kinetinę energiją masių centro atžvilgiu E_{CM} :

$$E_{CM} = \frac{M_2}{(M_1 + M_2)} E_{LAB}. \quad (16)$$

Masių centro sistemoje diferencialinis Rezerfordo sklaidos skerspjūvis tada apibrėžiamas [36]:

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{CM} = \left(\frac{Z_1 Z_2 e^2}{16\pi\epsilon_0 E_{CM}}\right)^2 \frac{1}{\sin^4(\theta_{CM}/2)}, \quad (17)$$

čia ϵ_0 yra vakuumo dielektrinė skvarba, Ω – erdvinis kampas, Z_1 ir Z_2 yra krintančiosios dalelės ir taikinio atomo krūvio skaičiai, o e – elementarusis krūvis. Skerspjūvio vertinimai rodo, kad eksperimentiniai skerspjūviai skiriasi nuo teorinių tiek aukštų, tiek ir žemų energijų srityse. Žemų energijų srityje ($< 0,5$ MeV) nuokrypis nuo teorinio Rezerfordo sklaidos skerspjūvio atsiranda dėl taikinio atomų branduolių dalinio ekranavimo elektronų apvalkalais, kurie supa branduolius [54]–[56]. Dėl branduolį supančio elektronų debesies, krintančioji dalelė patiria silpnesnę stūmą nuo taikinio branduolio sklindant elektronų debesyje, taip patiriant ir mažesnę stabdomąjį efektą lyginant su neekranuotu Rezerfordo atveju. Ekranavimo korekcija atliekama sklaidos skerspjūvį dauginant iš Andersen'o ekranavimo faktoriaus $F(E, \theta)$ [55]:

$$F(E, \theta)_{Andersen} = \frac{\left(1 + \frac{V_1}{2E_{CM}}\right)^2}{\left(1 + \frac{V_1}{E_{CM}} + \left[\frac{V_1}{2E_{CM}\sin\{\theta_{CM}/2\}}\right]^2\right)^2}, \quad (18)$$

čia E_{CM} energija nurodoma kiloelektronvoltais (keV), o V_1 įvertinama pagal:

$$V_1[keV] = 0.04873 \cdot Z_1 Z_2 \left(Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3}\right)^{1/2}. \quad (19)$$

Didesnių energijų srityje ($> 0,5$ MeV) eksperimentinio sklaidos skerspjūvio nuokrypis nuo teorinio Rezerfordo sklaidos skerspjūvio atsiranda dėl branduolinių jėgų įtakos tarp krintančiosios dalelės ir taikinio branduolio. Šis efektas stipriai priklauso nuo energijos, sklaidos kampo ir dalelės – branduolio poros [57]–[61]. Šiuo metu vienintelis būdas atsižvelgti į ne Rezerfordinį sklaidos skerspjūvį yra naudotis išmatuotų skerspjūvių

lentelėmis. Vieni iš pagrindinių įrankių ne Rezerfordiniams skerspjūviams gauti yra IBANDL duomenų bazė [62], [63] ir SigmaCalc skerspjūvių skaičiuoklė [47], [64]. Atgalinės sklaidos skerspjūviai SigmaCalc skaičiuoklėje pateikiami kaip santykis tarp ne Rezerfordinių ir Rezerfordinių skerspjūvių (angl., *Ratio To Rutherford*, RTR). Siekiant integruoti skerspjūvius modifikuojančius daugiklius į modelį, buvo specialiai sukuriami 2D vektoriai, į kuriuos įvedama RTR priklausomybė nuo energijos ir sklaidos kampo. Skaitinio modeliavimo metu kiekviename dalelės žingsnyje įvertinamas sklaidos kampas ir kinetinė energija. Pagal šiuos parametrus atliekama RTR vektoriaus duomenų interpoliacija. Teoriškai įvertintas Rezerfordo sklaidos skerspjūvis tada padauginamas iš atitinkamo RTR daugiklio.

Atsižvelgus į didelių ir mažų energijų skerspjūvių korekcijas, masių centro atskaitos sistemoje gautas diferencialinis skerspjūvis $\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{CM}$ konvertuojamas į laboratorijos atskaitos sistemos skerspjūvį $\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{LAB}$ pagal sąryšį:

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{LAB} = \frac{\left(1 + \frac{M_1^2}{M_2^2} + 2\frac{M_1}{M_2}\cos\theta_{CM}\right)^{3/2}}{1 + \frac{M_1}{M_2}\cos\theta_{CM}} \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{CM}. \quad (20)$$

Ši galutinė reakcijos skerspjūvio išraiška naudojama atgalinės sklaidos išėjai įvertinti. Sklaidos intensyvumas gaunamas naudojant šią išraišką lygtyje (4). Kai medžiaga yra sudaryta iš daugiau nei vienos rūšies atomų, atgalinės sklaidos intensyvumas skaičiuojamas kiekvienai rūšiai ir integruojamas į pilnutinį RBS spektrą.

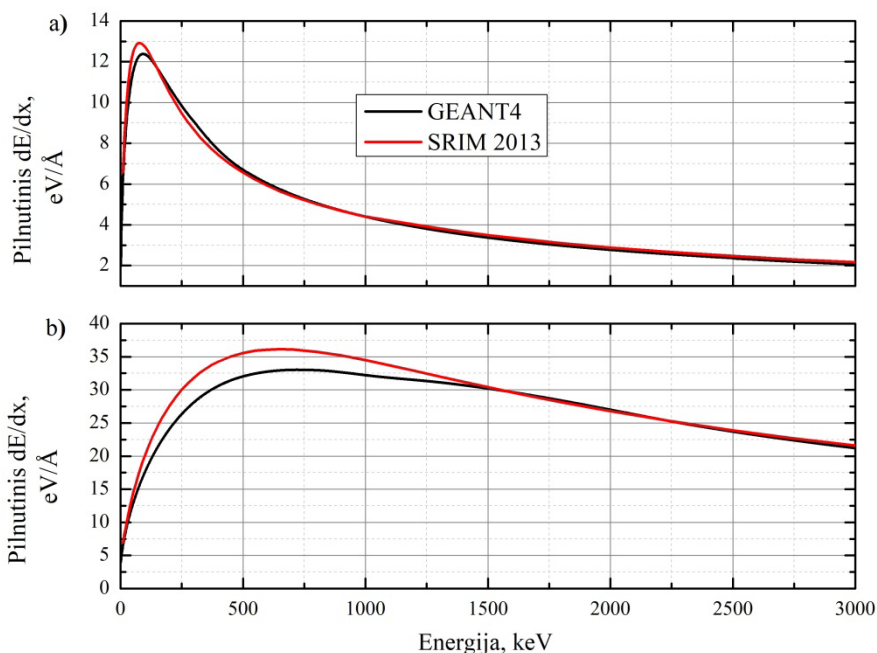
2.4. Energijos nuostolių vertinimas ir stabdomoji geba atgalinės sklaidos modelyje

Skaitinio modeliavimo metu dalelės energijos nuostolius medžiagoje valdo GEANT4 programinio paketo fizikinių procesų klasės, tačiau atgal išsklaidytos dalelės galutinė energija turi būti įvertinama rankiniu būdu. Tai susiję su tuo, kad skaitiškai modeliuojant atgalinės sklaidos spektrus naudojamos ne tikros atgal išsklaidytos dalelės, o teoriniai jų atitikmenys. Kadangi atgalinės sklaidos skerspjūviai yra sąlyginai maži, skaitinio modeliavimo metu būtinas didžiulis kiekis dalelių, kad būtų gaunamas statistiškai patikimas atgalinės sklaidos spektras. Siekiant optimizuoti skaitinio modeliavimo procesą, atgalinės sklaidos spektras įvertinamas pagal teorinį sklaidos skerspjūvį ir energijos nuostolius. Tai leidžia žymiai

paspartinti atgalinės sklaidos spektro generavimą nereikalaujant didžiulio krintančiųjų dalelių kiekio.

Ties kiekvienu dalelės žingsniu skaičiuojama teorinė atgal išsklaidytos dalelės energija pagal kinematinio faktoriaus išraišką (2). Tada vertinami dalelės nuostoliai kelyje iki detektoriaus paviršiaus. Teorinė išsklaidytos dalelės energija ties detektoriumi apskaičiuojama dalinant atstumą nuo sklaidos įvykio lokacijos iki bandinio paviršiaus į 100 vienodų intervalų ir integruojant energijos nuostolius iš kiekvieno intervalo. Teoriniai energijos nuostoliai įvertinami naudojant GEANT4 programinio paketo *G4EmCalculator* klasės funkciją *CalculateTotalDEDX*, kuri grąžina pilnutinę (elektroninę ir branduolinę) stabdomąją gebą nurodytoje medžiagoje esant tam tikrai energijai.

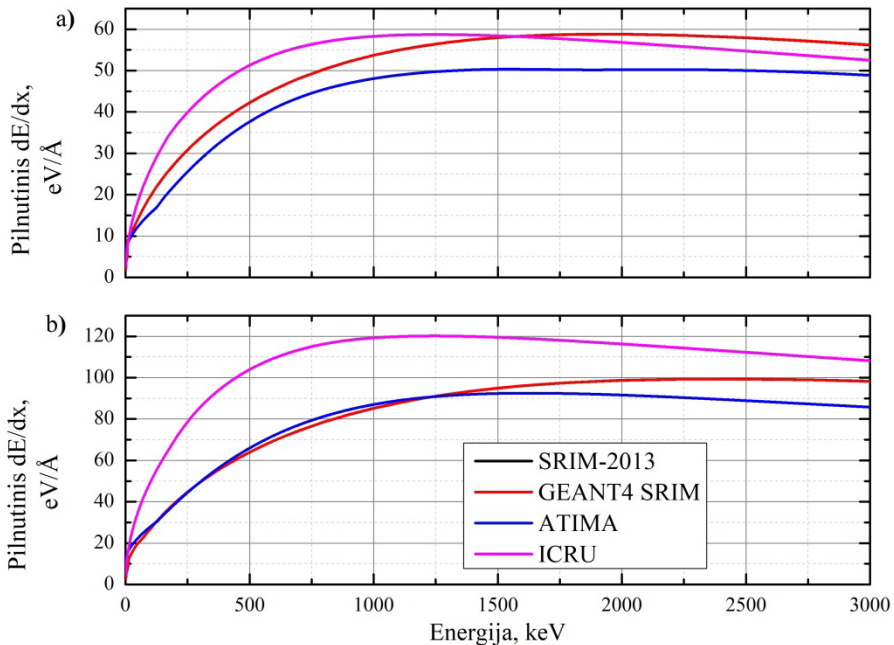
GEANT4 aplinkoje lengvųjų jonų stabdomosios gebos gaunamos naudojant PSTAR (protonai) ir ASTAR (helio jonai) bibliotekas [65]. Šios bibliotekos remiasi eksperimentiškai įvertintomis stabdomosiomis gebomis ir jonų siekais, pateiktai ICRU Report49 šaltinyje [66]. Aukštų energijų parametrai apskaičiuojami remiantis *Bethe* stabdomosios gebos sąryšiu [67], o žemose energijose naudojama interpoliacija, paremta eksperimentiniais duomenimis. Riba tarp aukštos ir žemos energijos ribų yra 0,5 MeV protonams ir 2 MeV alfa dalelėms. Ji susijusi su tuo, kad esant žemoms energijoms *Bethe–Bloch* formulės tikslumas žymiai suprastėja dėl elektronų sluoksnio korekcijos, todėl žemose energijose naudojamas stabdomųjų gebų parametrizavimas. Jeigu skaitiniame modeliavime naudojama medžiaga yra įtraukta į *NIST* (angl. *National Institute of Standards and Technology*) duomenų bazę, tada stabdomosios gebos skaičiavimuose naudojamas *NIST* parametrizavimas. Jeigu medžiagos nėra *NIST* duomenų bazėje – naudojama ICRU49 parametrizacija. GEANT4 atgalinės sklaidos modelyje naudojamos stabdomųjų gebų vertės buvo palygintos su SRIM–2013 stabdomosiomis gebomis protonams ir alfa dalelėms silicio dioksido (žr. 3 pav.). Didžiausias stabdomųjų gebų skirtumas protonų atveju siekia 10 % ties 30 keV energija, o vidutinis skirtumas tarp stabdomųjų gebų yra 4,5 %. Alfa dalelių atveju egzistuoja didesnis skirtumas energijų intervale iki 1,5 MeV – didžiausias skirtumas siekia 14 % ties 150 keV energija, o vidutinis skirtumas yra apie 9 %. Kitų autorių atlikti eksperimentinių rezultatų palyginimai rodo, kad stabdomosios gebos gali skirtis iki 20 % naudojant skirtingus šaltinius [68], [69], todėl gautas skirtumas tarp GEANT4 ir SRIM stabdomųjų gebų yra priimtinas.



3 pav. (a) protonų ir (b) alfa dalelių stabdomoji geba silicio diokside (tankis 2,32 g/cm³. Stabdomosios gebos įvertintos SRIM-2013 ir GEANT4 kodais.

GEANT4 aplinkoje sunkesnių nei He jonų energiniai nuostoliai vertinami naudojant *G4IonParametrisedLossModel* klasę, kuri naudoja ICRU Report73 stabdomųjų gebų duomenų bazę [70]. Vietoje ICRU duomenų bazės GEANT4 aplinkoje taip pat galima naudoti ATIMA (angl. *ATomic Interaction with MATter*) energijos nuostolių modelį [71]. Pagrindinis modelio ypatumas yra tas, kad stabdomosios gebos vertinimas remiasi SRIM kodo protonų parametrizavimu [72], kai krintančiojo jono energija mažesnė nei 10 MeV/amu, o virš 10 MeV/amu naudojamas *Lindhard–Soerensen* (LS) modelis [73]. Didesniam skaitinio RBS modelio universalumui taip pat buvo sukurtas specialus algoritmas, kuriuo galima įterpti SRIM–2013 stabdomųjų gebų vertes į GEANT4 modelį. Tam tikslui buvo sukurta speciali duomenų lentelė naudojant *G4ExtDEDXTable* klasę, į kurią buvo nuskaitomos stabdomosios gebos, gautos SRIM–2013 kodu. Siekiant naudoti ICRU arba SRIM stabdomąsias gebas, originali *G4IonParametrisedLossModel* klasė buvo modifikuota. Ličio jonų stabdomųjų gebų palyginimas 0 – 3 MeV energijos intervale buvo atliktas silicio dioksido ir hafnio dioksido medžiagoms (žr. 4 pav.). Ličio jonų atveju gaunamas didžiulis skirtumas tarp SRIM, ATIMA ir ICRU stabdomųjų gebų bibliotekų. Stabdomoji geba silicio dioksido pagal ICRU biblioteką nedaug skiriasi nuo kitų skaitiniame modeliavime naudotų bibliotekų, tačiau stebima

net 36 % didesnė stabdymo geba HfO_2 medžiagoje ties 0,75 MeV energija. Naudojant ATIMA biblioteką, ličio jonų stabdomoji geba energijų diapazone virš 1,5 MeV pradeda atsilikti nuo kitų bibliotekų, o SiO_2 atveju mažesnė stabdomoji geba gaunama nuo pat energijos intervalo pradžios. Lyginant GEANT4–SRIM ir SRIM–2013 stabdomąsias gebas gaunamas idealus atitikimas. Ličio ir sunkesniems jonams rekomenduojama naudoti SRIM–2013 stabdomųjų gebų bibliotekas [74], [75], todėl šio darbo metu bandinių analizė buvo atliekama naudojant būtent SRIM biblioteką, o ATIMA ir ICRU duomenys buvo naudojami palyginimui.



4 pav. Ličio jonų stabdomosios gebos: a) SiO_2 (tankis 2,32 g/cm³); b) HfO_2 (tankis 9,68 g/cm³). Stabdomosios gebos įvertintos SRIM–2013 kodu ir GEANT4 kodu naudojant skirtingas bibliotekas (ATIMA, ICRU ir GEANT4–SRIM).

2.5. Dalelių energijos išsibarstymo vertinimas

Dalelių pluošteliui sklindant medžiagoje, stabdymo procesas vyksta per individualius susidūrimus su taikinio atomais. Priklausomai nuo energijos, taikinio atomų rūšies, sklaidos kampo ir kitų parametrų atsiranda energijos nuostolių statistinės fliuktuacijos. Šis procesas vadinamas energine sklaida (angl. *energy straggling*) arba energijos nuostolių sklaida (angl. *energy loss straggling*). Jis lemia dalelių energijos pasiskirstymo išplatėjimą. Energijos nuostolių sklaidą galima kategorizuoti į dvi dalis – elektroninių energijos

nuostolių ir branduolinių energijos nuostolių sklaidas. Elektroninių energijos nuostolių sklaida nurodo dalelės prarandamos energijos fliktuacijas sąveikaujant su atomų elektronais, o branduolinių energijos nuostolių sklaida rodo prarandamos energijos fliktuacijas dėl sąveikos su medžiagos atomų branduoliais.

Elektroninės energinės sklaidos teorija pirmiausia buvo sukurta didelės energijos jonams. *Bohr* energinės sklaidos vertinimas paremtas pilnai jonizuotų didelės energijos jonų ir laisvųjų elektronų dujų sąveikos modeliu [76]. *Bohr* energinės sklaidos modelis remiasi trimis prielaidomis: a) krintančiosios dalelės greitis yra žymiai didesnis už taikinio atomų elektronų, sklindančių orbitale, greitį; b) energijos nuostoliai yra maži lyginant su dalelės pilnutine energija; c) taikinio atomai yra atsitiktinai pasiskirstę medžiagoje ir kanaliavimo procesas nevyksta. Prielaidos b) ir c) atitinka daugumoje atvejų sąveikaujant su amorfine medžiaga, tačiau prielaida a) neatitinka kai dalelės energija yra žemiau vidutinės (1 – 300 keV/amu). *Lindhard–Scharff* [77] išplėtė *Bohr* modelį pritaikant korekcijos faktorių, atsižvelgus į lokalų taikinio atomų elektronų tankį. Remiantis juo, esant pakankamai didelei dalelės energijai, energijos nuostolių sklaida yra lygi *Bohr* sklaidai, o žemų energijų srityje priklauso nuo dalelės energijos. Modifikuotas modelis rodo, kad energijos nuostolių sklaida turi didėti didėjant taikinio atomų krūvio skaičiui Z esant tai pačiai energijai, tačiau eksperimentiškai pastebėta priklausomybė nuo Z skaičiaus neatitiko teorijos. Pastebėta, kad esant žemai dalelių energijai, energijos sklaida turi osciliuojančią priklausomybę nuo taikinio atomų Z skaičiaus. Pirmasis šią priklausomybę paaiškino *Chu* [78], teoriškai įvertinęs sklaidą protonams ir helio atomams, atsižvelgiant į atominio krūvio pasiskirstymą naudojant *Hartree–Fock–Slater* modelį. Galiausiai, pilnutinę energijos nuostolių sklaidą apibūdino *Yang*, atsižvelgdamas į visas prieš tai minėtas pataisas bei pateikiant empirinę formulę, kuri tinka tiek lengviesiems, tiek ir sunkiesiems jonams [79]. GEANT4 programinio paketo aplinkoje energijos nuostolių sklaida įvertinama remiantis *Yang* empirine išraiška [79]:

$$\frac{\sigma^2}{\sigma_{Bohr}^2} = \gamma^2(Z_1, Z_2, v) \frac{\sigma_{Chu}^2}{\sigma_{Bohr}^2} + \frac{\Delta\sigma^2}{\sigma_{Bohr}^2}, \quad (21)$$

čia γ yra efektyvusis jono krūvio faktorius ($\gamma \leq 1$), v yra jono greitis, $\Delta\sigma^2$ – energijos nuostolių sklaida dėl koreliacinių efektų, σ_{Chu}^2 yra sklaidos faktorius pagal *Chu* teoriją [78], o σ_{Bohr}^2 yra *Bohr* energijos nuostolių sklaida [80], kuri apibūrinama lygtimi [81]:

$$\sigma_{Bohr}^2 = 4\pi e^4 Z_1^2 Z_2 N \Delta x, \quad (22)$$

čia e – elementarusis krūvis, N – atomų tankis, o Δx – atstumas. Programinio paketo GEANT4 aplinkoje elektroninių energijos nuostolių sklaidai įvertinti naudojamos formulės (21) ir (22) ir papildomos funkcinės klasės. Jono efektyviajam krūviui gauti naudojama *G4hIonEffChargeSquare* klasė, kuri įvertina dalelės efektyvųjų krūvi medžiagoje pagal kinetinę energiją. *Chu* sklaidos faktorius įvertinamas naudojant *G4IonChuFluctuationModel* klasę, o i sklaidą dėl koreliacinių efektų atsižvelgiama naudojant *G4IonYangFluctuationModel* klasę [82].

Branduolinių energijos nuostolių sklaida atsiranda dėl elastinių ir neelastinių susidūrimų bei branduolinių reakcijų. Šiai sklaidai įvertinti modelio rėmuose naudojama dispersijos išraiška [83]:

$$\sigma_n^2 = 0.26 \cdot Z_1^2 Z_2^2 \left(\frac{M_1}{M_1 + M_2} \right)^2 \frac{N \Delta x}{10^{18}}, \quad (23)$$

čia M_1, Z_1 ir M_2, Z_2 yra, atitinkamai, jono ir taikinio atomo masės ir krūvio skaičiai, N yra atomų tankis, o Δx atstumas. Paprastai lengviesiems jonams (protonai, helio jonai) branduoliniai energijos nuostoliai ir energinė sklaida yra maži, lyginant su elektroniniais energijos nuostoliais, tačiau tampa svarbūs, kai naudojami sunkesnieji jonai (pvz. Li).

2.6. Dalelių daugkartinė sklaida

Krintančiųjų dalelių daugkartinė sklaida mažais kampais (angl. *multiple scattering*) vyksta dalelei sklindant ir stojant medžiagoje. Ši daugkartinė sklaida lemia energijos skirstinio išplatėjimą dviem būdais [27]: a) jonų energija skiriasi dėl skirtingų nukeliautų atstumų; b) išsklaidytos dalelės energija priklauso nuo reakcijos kampo. Dėl šių priežasčių eksperimentiškai stebimas energijos pasiskirstymas nukrypsta per 10 – 20 % nuo normaliojo pasiskirstymo, kai sklaidos kampai maži, o skirtumas auga didėjant sklaidos kampui [84]. Teoriniam daugkartinės dalelių sklaidos sukeltam energijos skirstinio išplitimui įvertinti sukurti algoritmai [85], [86], kurie leidžia pakankamai tiksliai aproksimuoti galutinį dalelių energijos pasiskirstymą atgalinės sklaidos skaitiniame modeliavime. Aproksimacija atliekama naudojant *Pearson VII* pasiskirstymą [85]:

$$f(\theta, \tau) = \varphi \cdot \left(1 + \frac{4 \theta^2 \left(\frac{2}{2^{m+1}} - 1 \right)}{(\Delta\theta)^2} \right)^{-\frac{m+1}{2}}, \quad (24)$$

čia τ – redukuotas dalelės nukeliamas atstumas, m – vadinamasis formos faktorius, θ – svertinis sklaidos kampas (sklaidos kampo ir svertinio daugiklio sandauga), $\Delta\theta$ – pasiskirstymo plotis pusės maksimumo aukštyje FWHM (angl. *Full Width at Half Maximum*), o φ – normalizavimo konstanta:

$$\varphi = \frac{\Gamma\left(\frac{m+1}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{m}{2}\right)\sqrt{\pi}} \frac{2}{\Delta\theta} \sqrt{\left(\frac{2}{2^{m+1}} - 1\right)}, \quad (25)$$

čia Γ – gamma funkcija $\Gamma(n) = (n-1)!$. Daugkartinė sklaida teoriškai atgal išskaidytai dalelei GEANT4 atgalinės sklaidos modelyje įvertinama remiantis keliais etapais. Pirmiausia daugiaelementiniai sluoksniai yra pakeičiami ekvivalenčios struktūros sluoksniais, kurie sudaryti iš monoelementinių 2 – 10 nm storio posluoksnių. Posluoksniu storis priklauso nuo krintančiųjų dalelių rūšies ir energijos. Toks pasirinkimas atliekamas išlaikant sąlygą, kad dalelių energijos nuostoliai praėjus tokį posluoksnį būtų maži ($< 10\%$) [86]. Į tokio tipo geometriją leidžiama viena dalelė ir skaičiuojamas daugkartinės dalelių sklaidos sukeltas energijos išplitimo plotis FWHM ir *Pearson VII* pasiskirstymo formos faktorius m . Specialiai sukurtose lentelėse išsaugoma šių parametrų priklausomybė nuo taikinio atomo tipo ir gylio bandinyje. Kai užpildomos lentelės, pradedama realių dalelių skaitinė simuliacija. Kiekviename dalelės žingsnyje daugkartinės dalelių sklaidos įtaka įvertinama interpoliuojant anksčiau užpildytų lentelių duomenis.

Siekiant gauti galutinį dalelių energinį pasiskirstymą būtina atsižvelgti į energijos skirstinio išplitimą dėl energijos nuostolių dispersijos (Normalusis pasiskirstymas) ir daugkartinės dalelių sklaidos (*Pearson VII* pasiskirstymas). Galutinis pasiskirstymas aproksimuojamas *Pearson VII* funkcija. Šio pasiskirstymo formos faktorius ir plotis FWHM gaunami atliekant pasiskirstymų konvoliuciją (angl. *convolution*). Funkcijų konvoliucija naudoja daug kompiuterinių resursų, todėl skaitiniame modeliavime jos vengiama. Vietoj tikrosios konvoliucijos naudojamas sumavimo metodas, detalizuotas [27] šaltinyje. Jame pateikti įvairių *Pearson VII* pasiskirstymų konvoliucijų rezultatai, naudojant skirtingus formos m ir pločio parametrus. Skaitinio modeliavimo metu vietoj konvoliucijų atliekama interpoliacija tarp lentelės rezultatų. Gautas formos parametras ir

plotis FWHM naudojamas aproksimuojant galutinę dalelių energinį pasiskirstymą *Pearson VII* funkcija. Jeigu skaitiniame modeliavime nevertinama daugkartinė dalelių sklaida, galutinis dalelių energinis pasiskirstymas aproksimuojamas Normaliuoju pasiskirstymu.

2.7. Detektoriaus parametrai ir spektro skaitinis modeliavimas

GEANT4 atgalinės sklaidos modelyje detektoriaus energinė skyra naudojama kaip modelio naudotojo pateikiamas parametras FWHM. Energinė skyra protonams paprastai siekia 10 – 20 keV, o alfa dalelėms 15 – 30 keV. Modelyje taip pat pridėta galimybė apskaičiuoti teorinę detektoriaus energinę skyrą sunkiesiems jonams. Šiuo atveju detektoriaus energinė skyra yra kintanti ir priklauso nuo jono energijos. Sunkiųjų jonų energinė skyra apskaičiuojama pagal [87]:

$$FWHM[keV] = C_1 Z_1^{C_2} (\ln[E_{keV}])^{C_3} - C_4 Z_1^{C_5} / (\ln[E_{keV}])^{C_6}, \quad (26)$$

čia C_1 – C_6 yra konstantos, kurių vertės nurodytos [87] šaltinyje, Z_1 yra detektuojamos dalelės krūvio skaičius, o E_{keV} – dalelės kinetinė energija kiloelektronvoltais. Ši lygtis galioja sunkesniems nei He^4 jonams, kai jų energija didesnė nei 0,2 MeV. Didžioji dauguma dalelių detektorių turi vadinamąjį neaktyvų sluoksnį, kuriame nevyksta dalelių detekcija. Šio neaktyvaus sluoksnio įtaka įvertinama skaičiuojant energijos nuostolius ir energinę sklaidą anksčiau minėtais metodais. Skaitiškai modeliuojant atgalinės sklaidos spektrus, daroma prielaida, kad dalelių galutinės energijos pasiskirstymas artėja prie Normaliojo pasiskirstymo. Tokiu atveju pasiskirstymo dispersija yra detektoriaus energinės skyros ir dalelių energinės sklaidos suma:

$$\sigma = \sqrt{\sum_{b,el}^N \sigma^2 + \sum_{b,nuc}^N \sigma^2 + \sum_{d,el}^N \sigma^2 + \left(\frac{FWHM}{2.355}\right)^2}, \quad (27)$$

čia $\sum_{b,el}^N \sigma^2$ yra elektroninių energijos nuostolių sklaidos suma, pagal visus medžiagos elementus N , $\sum_{b,nuc}^N \sigma^2$ – branduolinių energijos nuostolių sklaidos suma, $\sum_{d,el}^N \sigma^2$ – detektoriaus neaktyviojo sluoksnio elektroninių energijos nuostolių sklaida, o paskutinis dėmuo yra detektoriaus energinė skyra. Jeigu skaitinio modeliavimo metu pasirenkama atsižvelgti į daugkartinę dalelių sklaidą, tada atgalinės sklaidos spektras tinkamas naudojant *Pearson VII* pasiskirstymą, kuris aprašytas 2.6 skyriuje.

2.8. Eksperimentinė atgalinės sklaidos spektrų matavimo aparatūra

Teoriniam GEANT4 atgalinės sklaidos modeliui validuoti buvo naudoti protonų, helio ir ličio jonų pluošteliai. Vertinant teorinių atgalinės sklaidos skerspjūvių patikimumą, skaitinio modeliavimo metu gauti protonų atgalinės sklaidos skerspjūviai buvo palyginti su eksperimentiniais spektrais, adaptuotais pagal [57] šaltinį. Kitais atvejais bandinių apšvita protonais ir ličio jonais buvo atlikta naudojant 2 MV Tandetron 4110A (*General Ionex Corporation, JAV*) tandeminio tipo jonų greitintuvą, esantį Fizinių ir Technologijos mokslų centre, Branduolinių tyrimų skyriuje. Atgalinės sklaidos spektrai registruoti naudojant AMETEK–ORTEC (JAV) puslaidininkinį gryno silicio detektorių su 15 keV FWHM energine skyra 5,5 MeV energijos alfa dalelėms. Krintančiųjų dalelių pluoštas buvo nukreiptas statmenai į bandinių paviršių, o detekcijos kampas buvo 135°. Helio jonų eksperimentiniai spektrai adaptuoti pagal [88] šaltinį. Šiuo atveju buvo naudoti ULTRA™ Alpha AMETEK–ORTEC detektoriai, dalelių pluoštelis buvo statmenas bandinių paviršiams, o detekcijos kampas buvo 173,4°. Eksperimentinės bandinių analizės sąlygos pateiktos lentelėje 1. Medžiagų tankis gali skirtis tarp skaitinio modeliavimo kodų, todėl standartizavimui pasirinkta naudoti TFU (angl. *Thin Film Unit*, 1 TFU = 10¹⁵ at/cm²) vieneta, kuris nepriklauso nuo atomų tankio.

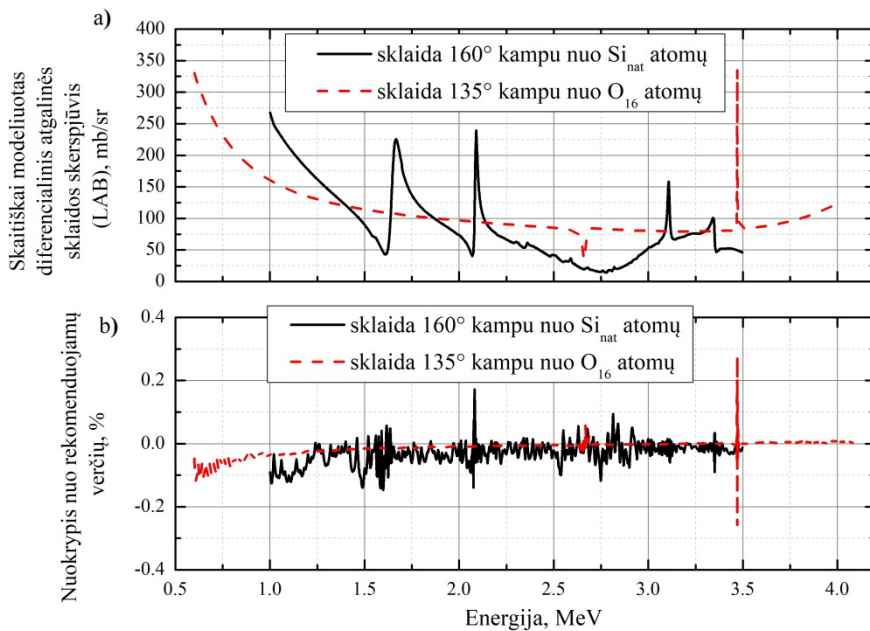
1 lentelė. Eksperimentinės bandinių ir dalelių pluošto sąlygos

Bandinys	Dalelių pluoštelis	Dalelių energija, MeV	Surinktas krūvis, μC	Sluoksnis	Sudėtis	Storis, TFU
Kvarcinio stiklo padėklas FS SiO_2	Protonai	1,6	3,7	1	SiO_2	Padėklas
$\text{HfO}_2/\text{FS SiO}_2$	Protonai	2,0	0,7	1	0,936 HfO_2 + 0,064 Ar	1470
	Li^{2+}	3,0	0,8	2	SiO_2	Padėklas
$\text{SiO}_2/\text{Nb}_2\text{O}_5/\text{FS SiO}_2$	Protonai	1,5	2,6	1	SiO_2	1930
				2	Nb_2O_5	1580
				3	SiO_2	Padėklas
Au/Ni/ SiO_2 /Si	He^+	3,06	1,9	1	Au	14
				2	0,92 Ni + 0,08 Cu	50
				3	SiO_2	2000
				4	Si	Padėklas

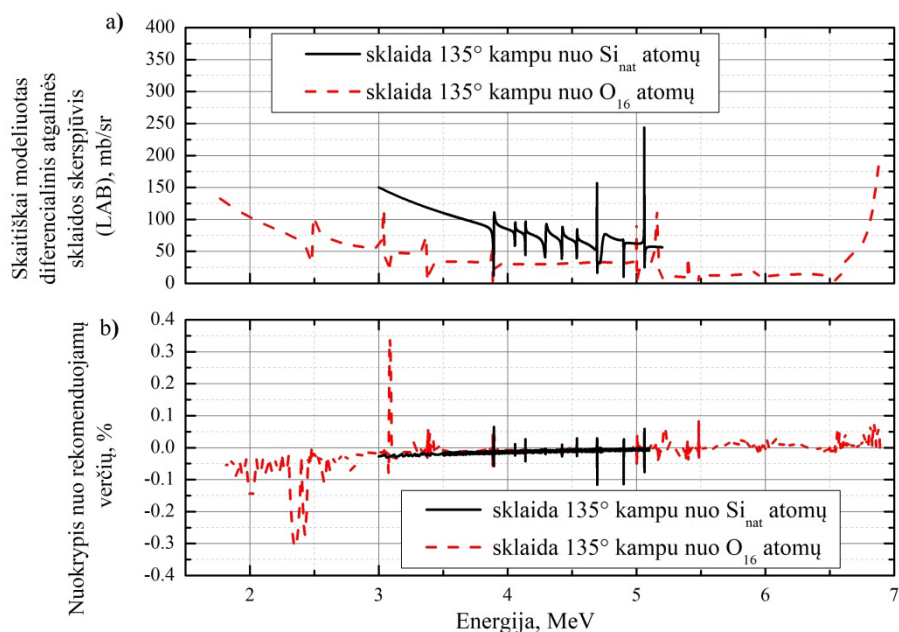
2.9. Rezultatai

2.9.1. Atgalinės sklaidos reakcijos skerspjūvio vertinimas

Siekiant užtikrinti modelio skaičiuojamų reakcijos skerspjūvių tikslumą, jie buvo palyginti su literatūroje naudojamais (rekomenduojamais) skerspjūviais, kurie gauti SigmaCalc [64] skaičiuokle. Protonų atgalinės sklaidos skerspjūviai, gauti vykstant sklaidai 160° kampu nuo natūralios sudėties Si ir 135° kampu nuo O^{16} atomų, pateikti 5 pav.. Modelis puikiai atitinka rekomenduojamus skerspjūvius – didžiausi nuokrypiai siekia iki 0,4 %. Toks pat puikus skerspjūvių atitikimas gautas ir alfa dalelėms, vykstant sklaidai 135° kampu nuo SiO_2 bandinio (žr. 6 pav.). Kaip ir protonų atveju, didžiausi nuokrypiai tarp skerspjūvių gaunami rezonansiniuose regionuose. 5 pav. ir 6 pav. rodo, kad GEANT4 atgalinės sklaidos modelis puikiai skaitiškai modeliuoja reakcijos skerspjūvius Si ir O atomams protonų ir alfa dalelių atveju. Panašus atitikimas gaunamas ir kitiems taikinių atomams.



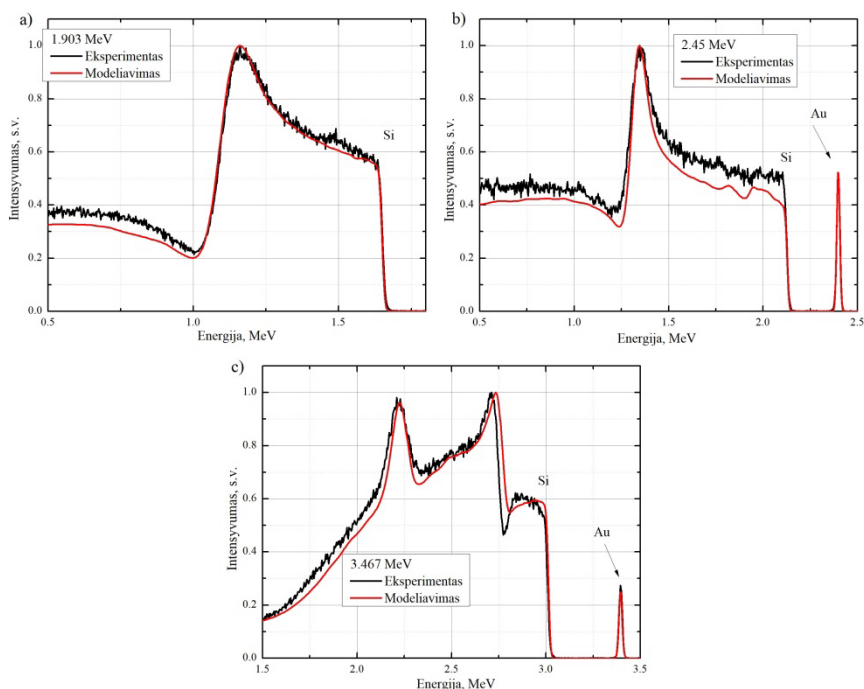
5 pav. a) Atgalinės sklaidos skerspjūviai $Si(p,p')Si$ reakcijai 160° ir $O^{16}(p,p')O^{16}$ reakcijai 135° kampais, gauti GEANT4 RBS modeliu; b) GEANT4 modelio įvertintų skerspjūvių nuokrypis nuo SigmaCalc skerspjūvių.



6 pav. a) Atgalinės sklaidos skerspjūviai Si(a,a')Si reakcijai 135° ir O¹⁶(a,a')O¹⁶ reakcijai 135° kampais, gauti GEANT4 RBS modeliu; b) GEANT4 modelio įvertintų skerspjūvių nuokrypis nuo SigmaCalc skerspjūvių.

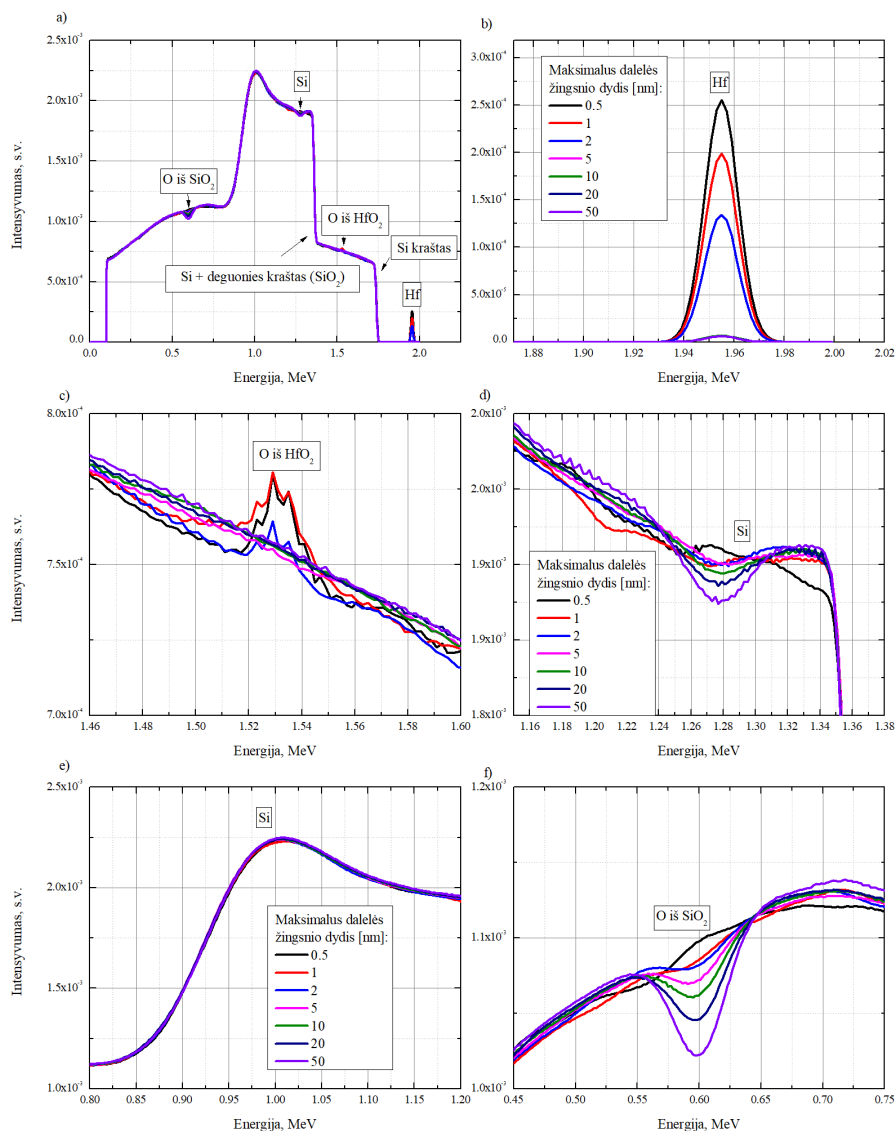
Siekiant įvertinti skaitiškai modeliuojamų atgalinės sklaidos skerspjūvių patikimumą, atgalinės sklaidos spektrai buvo palyginti su eksperimentiniais kitų autorių spektrais, gautais detektavus 160° kampu išsklaidytus 1,9 – 3,47 MeV energijos protonus nuo gryno silicio bandinių [57]. Kaip galima pastebėti, eksperimentiniai ir teoriniai atgalinės sklaidos spektrai ne visada sutampa (žr. 7 pav.). Teoriniai atgalinės sklaidos skerspjūviai dažnai nukrypsta nuo eksperimentinių skerspjūvių dėl stabdomųjų gebų ir energinės sklaidos neapibrėžčių, taip pat dėl riboto teorinių skerspjūvių patikimumo [57], [59]. Spektuose papildomai stebima Au smailė, kuri atsiranda dėl plono aukso sluoksnio, užgarinto ant bandinių dėl eksperimentinių ypatumų.

Geras spektrų atitikimas gaunamas prie mažesnių energijų, o didėjant krintančiųjų protonų energijai teorinių spektrų nuokrypiai nuo eksperimentinių didėja. Skaitiškai modeliuotos energinės spektrų pozicijos 1,9 ir 2,5 MeV energijų atvejais puikiai atitinka eksperimentines, tačiau stebimi smailių nuokrypiai ties 3,5 MeV krintančiųjų protonų energija. Tai rodo, kad GEANT4 modelis tinka skaitiškai modeliuoti spektrus, tačiau spektrai ypatingai priklauso nuo ne Rezerfordinių skerspjūvių bibliotekos duomenų tikslumo [57].



7 pav. Eksperimentiniai ir GEANT4 modeliu simuluoti protonų RBS spekrai nuo Si bandinio 160° kampu. Protonų energijos: a) 1,903 MeV; b) 2,45 MeV; c) 3,467 MeV. Eksperimentiniai rezultatai adaptuoti pagal [57].

Skaitiškai modeliuojant dalelių atgalinės sklaidos spektrus GEANT4 modelyje skirtingos medžiagos yra dalinamos į sluoksnius. Esant plonam sluoksniui, simuluojant dalelių pluoštelį gali būti gaunamas jau anksčiau minėtas mažas žingsnių skaičius sluoksnyje, todėl statistiškai patikimam įvertinimui naudojamas dalelės žingsnio dydžio apribojimas. Esant dideliame sluoksniui, dalelės žingsnio dydžio apribojimas skaitiškai modeliuojamam atgalinės sklaidos spektrui didelės įtakos nedaro. Žingsnio dydžio įtakos vertinimas atliktas 5 nm storio HfO_2 sluoksniui ant SiO_2 bandinio (žr. 8 pav.).



8 pav. 2 MeV energijos protonų indukuoti RBS spektrai, gauti naudojant skirtingus dalelės žingsnio dydžio apribojimus GEANT4 modelyje: a) pilnutinis spektras; b) Hf signalas; c) O signalas iš HfO₂; d) Si signalas iš SiO₂; e) Si rezonansinė zona; f) O signalas iš SiO₂.

Siekiant įvertinti įtaką spektrui, kai sluoksniai sudaryti iš tos pačios medžiagos, papildomai SiO₂ medžiagoje buvo įterptas atskiras 5 nm storio SiO₂ sluoksnis. Protonų pluoštelio energija buvo 2 MeV, o atgalinės sklaidos kampas siekė 160°. Pilnutiniame atgalinės sklaidos spektre (žr. 8 pav. a) žingsnio dydžio ypatumai nevisai akivaizdūs. Didelės energijos srityje Hf

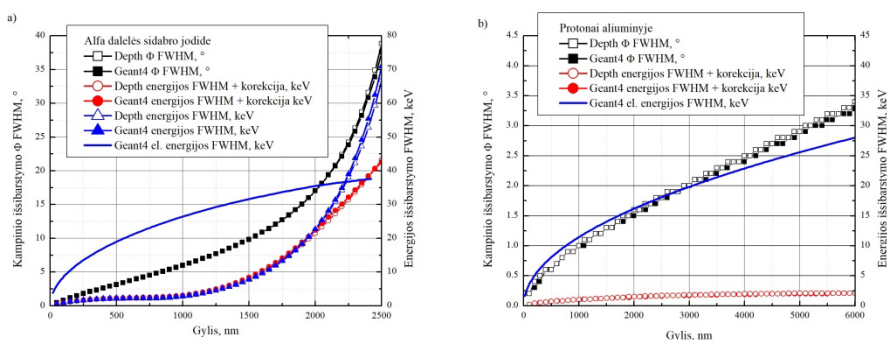
signalo intensyvumas iš HfO_2 sluoksnio stipriai priklauso nuo žingsnio dydžio (žr. 8 pav. b): kai žingsnio dydis apribotas iki sluoksnio storio (5 nm), atgalinės sklaidos signalas praktiškai nestebimas, tačiau atsiranda, kai žingsnio dydis yra mažesnis už sluoksnio storį (2 nm). Signalas dar labiau išryškėja žingsnio dydį sumažinus iki 0,5 nm, kas yra 10 kartų mažiau nei HfO_2 sluoksnio storis. Tai susiję su didesniu žingsnių skaičiumi ir detalesniu dalelių energijos pasiskirstymo vertinimu tokiaame sluoksnyje, todėl gaunama geresmė atgalinės sklaidos skaitinio modeliavimo statistika (didesnis sąveikos įvykių skaičius vienai dalelei) ir ryškesnis signalas. Deguonies signalas iš HfO_2 dangos taip pat praktiškai nestebimas esant didesniai nei 5 nm žingsnio dydžiui (žr. 8 pav. c). Sumažinus žingsnio dydį iki 0,5 – 1 nm signalas išauga iki maksimalios vertės. Papildomo 5 nm silicio dioksido sluoksnio įtaka atgalinės sklaidos spektrui taip pat stipriai priklauso nuo žingsnio dydžio (žr. 8 pav. d, f). Sumažinus žingsnio dydį iki 1 nm spektro sritis, simbolizuojanti atgalinę sklaidą riboje tarp sluoksnių, tampa labiau tolydesnė, o esant didesniai žingsnio dydžiui stebimi spektro intensyvumo sumažėjimai ir formos iškreipimai. Kai skaitiškai modeliuojamas sluoksnis yra storas, žingsnio dydžio įtaka tampa žymiai mažesnė. Rezonansinė atgalinės sklaidos smailė ties $\sim 1,0$ MeV energija išlieka praktiškai vienodo intensyvumo visais žingsnio dydžio atvejais (žr. 8 pav. e). Tai rodo, kad storuose medžiagos sluoksniuose dalelės žingsnio dydžio įtaka yra minimali.

Apibendrinant galima teigti, kad skaitiškai modeliuojant plonus sluoksnius būtina apriboti dalelių žingsnio dydį iki tokio, kuris lemtų pakankamai daug dalelės sąveikos įvykių tame sluoksnyje, bet būtų optimalus modeliavimo trukmės atžvilgiu. Simuliuojant plonus sluoksnius (plonesnius nei 20 nm) geriausias rezultatas gaunamas apribojant dalelės žingsnio dydį iki 0,5 nm. Skaitiškai modeliuojant storesnius sluoksnius žingsnio dydžio apribojimo galima nenaudoti, tačiau būtina kompensuoti sumažėjusį įvykių skaičių didinant modeliuojamų dalelių skaičių.

2.9.2. Daugkartinės dalelių sklaidos įtaka

GEANT4 atgalinės sklaidos modelio rėmuose integruotas daugkartinės dalelių sklaidos vertinimo algoritmas buvo palygintas su skaitinio modeliavimo kodu Depth [85]. Daugkartinės sklaidos parametrai buvo įvertinti 2 MeV energijos alfa dalelėms sąveikaujant su sidabro jodidu (žr. 9 pav. a) ir 2 MeV energijos protonams sąveikaujant su aliuminiu (žr. 9 pav. b). Dalelių pluošteliai sudarė 15° kampą su bandiniu, o detekcijos kampas buvo 150° . Alfa dalelių atveju papildomai buvo įvedama

stabdamosios gebos korekcija, kurią naudojant atsižvelgiama į energijos sklaidą iš storų bandinio sluoksnių. Protonams šiuo atveju korekcija įtakos nedaro, tačiau alfa dalelėms egzistuoja stipri korekcijos įtaka, kai sklaida medžiagoje vyksta didesniame nei 2 μm gylyje (žr. 9 pav. a). Tai susiję su alfa dalelių energija ir žymia stabdomosios gebos priklausomybe nuo energijos prieš pilnai sustojant dalelei. Protonams maksimalus GEANT4 atgalinės sklaidos modelio rezultatų nukrypimas nuo Depth programos rezultatų siekia 20 %, o vidutinis nuokrypis siekia 2,6 % energijos ir kampo pločiams. Alfa dalelių atveju maksimalus nuokrypis siekia 14 %, o vidutinis nuokrypis yra 6 % energijos sklaidos ir 4 % kampinės skėsties pločiams. Atsižvelgiant į šiuos rezultatus galima teigti, kad GEANT4 modelyje integruotas daugkartinės sklaidos skaičiavimo algoritmas veikia pakankamai tiksliai.

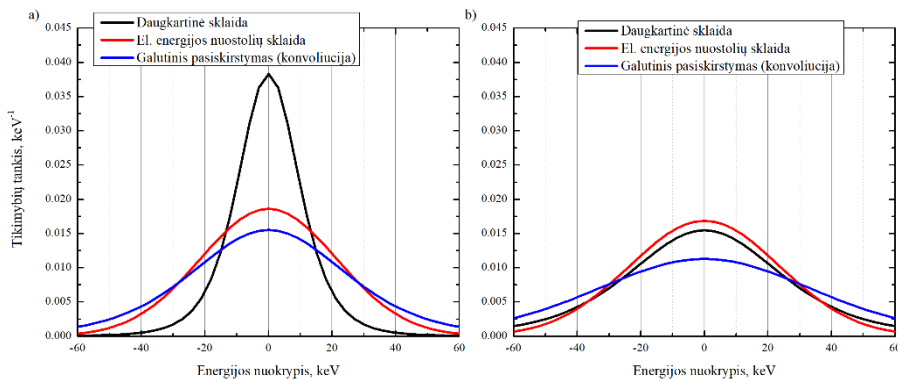


9 pav. Kampinės ir energinės sklaidos FWHM dėl daugkartinės sklaidos, įvertintos naudojant GEANT4 RBS modelį ir Depth programinį paketą: (a) alfa dalelių sidabro jodide; (b) protonų aliuminyje.

Vertinant protonų pluoštelio sklaidą, gaunama, kad praėjus 6 μm medžiagos sluoksni, daugkartinės dalelių sklaidos sukeltas energinės sklaidos plotis siekia apie 2,1 keV. Tuo tarpu elektroninių energijos nuostolių sklaidos plotis siekia 28 keV. Prie elektroninių energijos nuostolių skirstinio pločio pridėjus detektoriaus energinę skyrą (mažiausiai 10 keV), gaunama, kad daugkartinės dalelių sklaidos sukurtas energijos skirstinio išplitimas nedaro žymios įtakos galutinei energinės sklaidos vertei. Dėl to didelio kampo protonų atgalinės sklaidos spektruose galima atmesti daugkartinės dalelių sklaidos įtaką.

Vertinant daugkartinę dalelių sklaidą sunkesniųjų jonų atveju atsiranda įtaka, į kurią būtina atsižvelgti. Bandinio paviršiuje dominuoja elektroninių energijos nuostolių sklaida, tačiau didėjant sąveikos įvykio gyliui, daugkartinės sklaidos sukelta energinė sklaidos vertė priartėja prie

elektroninių energijos nuostolių sklaidos vertės ir net ją viršija (žr. 9 pav. a). Dėl to skaitiškai modeliuojant sunkesniųjų dalelių atgalinės sklaidos spektrus būtina atsižvelgti į daugkartinės sklaidos efektą. Šis efektas pavaizduotas 10 pav.. Čia pateiktas Normalusis pasiskirstymas dėl elektroninių energijos nuostolių, *Pearson VII* formos energinė sklaida dėl daugkartinės sklaidos ir galutinis *Pearson VII* formos energinis pasiskirstymas. 2 μm sklaidos gylyje (žr. 10 pav. a) daugkartinės sklaidos energijos pasiskirstymo funkcija yra intensyvi ir siaura lyginant su normaliuoju pasiskirstymu dėl elektroninių energijos nuostolių. Funkcijų konvoliucijos kreivė nedaug skiriasi nuo normaliojo pasiskirstymo – stebimas mažesnis intensyvumas ir platesni kraštai. Sklaidos įvykio 2,4 μm gylyje atveju (žr. 10 pav. b) daugkartinės sklaidos kreivė panaši į normaliojo pasiskirstymo kreivę su platesniais kraštais. Galutinis energinis pasiskirstymas turi mažesnę maksimalų intensyvumą ir yra išplitęs. Kadangi daugkartinės sklaidos įtaka pasireiškia dideliame bandinio gylyje, atgal išsklaidytos ir detektorių pasiekusios dalelės yra mažos energijos ir atgalinės sklaidos spektruose stebimos išplitusios ir mažiau intensyvios smailės žemos energijos regionuose.



10 pav. GEANT4 modeliu gautų alfa dalelių energijų tikimybių pasiskirstymai sklaidos 2 μm (a) ir 2,4 μm (b) gylyje atvejais. Paveiksluose pateikta daugkartinės dalelių sklaidos sukelta energinė sklaida, elektroninių energijos nuostolių sukelta sklaida ir galutinis pasiskirstymas po konvoliucijos.

2.9.3. Teorinių ir eksperimentinių spektrų palyginimas

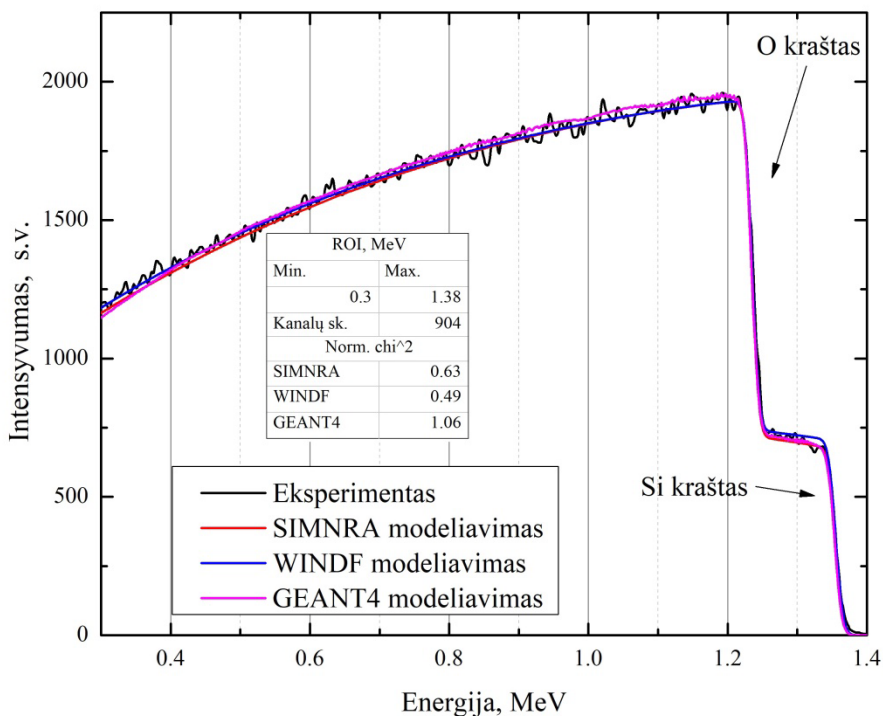
Skaitiškai modeliuojamų spektrų atitikimui įvertinti įvedamas normalizuotas *Pearson Chi kvadratų* testas [89]:

$$\chi^2 = \frac{1}{k} \sum_{i=1}^k \frac{(sim_i - data_i)^2}{\max(data_i, 4)}, \quad (28)$$

čia sim_i ir $data_i$ yra i -tojo kanalo vertė, atitinkamai, skaitiškai modeliuoto ir eksperimentinio spektrų atvejais, o k – kanalų skaičius. Daliklis $\max(data_i, 4)$ naudojamas spektro statistinių fliktuacijų (triukšmų) įtakai sumažinti. Juo pasirenkama maksimali vertė – jeigu kanalo vertė mažiau nei 4, naudojama dalyba iš 4, kitu atveju dalyba iš $data$ vertės. Konstantos 4 vertė parinkta analogiškai WiNDF pakete naudojamai vertei. Idealaus spektrų atitikimo atveju, χ^2 vertė artėja į 0. Priklausomai nuo eksperimento ypatybių (bandinio struktūra, medžiaga, pluoštelio energija ir kt.) dažnai galima atmesti žemų energijų ribą, kaip neduodančią esminės informacijos apie bandinį. Tuo tikslu apibrėžiama dominantis energinis intervalas (angl. *region of interest, ROI*), kuris nurodo interpretuojamo spektro ruožą. Žemiau pateiktuose spektruose ši riba nurodoma kiekvienam atvejui atskirai. Teoriniai spektrai taip pat buvo skaitiškai modeliuoti ir tinkinti kitais komerciniais įrankiais – SIMNRA [26] bei WiNDF [25]. Šie įrankiai naudoti palyginimui su GEANT4 atgalinės sklaidos spektrų skaitinio modeliavimo įrankiu. Komercinių įrankių naudojimas ir simuliacijos ypatumai nėra šios disertacijos tikslas, todėl detalesnė informacija apie skaitinio modeliavimo ypatumus pateikiama [90].

2.9.4. Protonų atgalinė sklaida nuo SiO₂ bandinio

Eksperimentiniai protonų atgalinės sklaidos spektrai nuo amorfinio kvarcinio stikliuko buvo palyginti su modeliavimo rezultatais (žr. 11 pav.). Šiuo atveju krintančiųjų protonų energija siekė 1,6 MeV, pluoštelis nukreiptas statmenai bandinio plokštumai. WINDF ir SIMNRA kreivės praktiškai neatskiriamos 0,6 – 1,2 MeV energijų diapazone, o GEANT4 atgalinės sklaidos modeliu gaunamas didesnis kreivės intensyvumas tame pačiame diapazone. Silicio kraštas yra geriau skaitiškai modeliuojamas GEANT4 ir SIMNRA metodais, o WINDF spektro intensyvumas aukštesnis nei eksperimentinės vertės. WINDF ir SIMNRA spektrų χ^2 vertės yra mažesnės nei 1, gautas puikus eksperimentinio spektro atitikimas. GEANT4 metodu gauta χ^2 vertė yra didesnė nei WINDF ir SIMNRA metodų, o pagrindinė to priežastis yra didesnis intensyvumas 0,6 – 1,2 MeV energijų diapazone. GEANT4 modeliu gautos deguonies ir silicio atomų atgalinės sklaidos energinės pozicijos puikiai atitinka eksperimentines pozicijas ir modelis tinkamas spektrų nuo amorfinio kvarcinio stiklo padėkliuko skaitiniam modeliavimui.

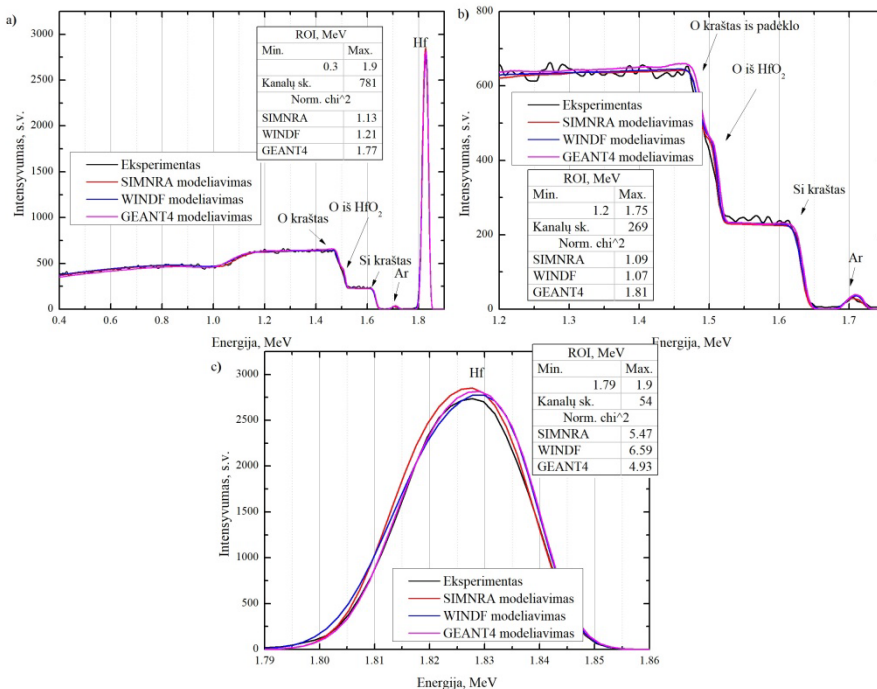


11 pav. 1,6 MeV energijos protonų atgalinės sklaidos spektrai nuo amorfinio kvarcinio stiklo.

2.9.5. Protonų ir ličio jonų atgalinė sklaida nuo HfO₂/FS SiO₂ bandinio

Jungtinė protonų ir ličio jonų atgalinės sklaidos analizė buvo atlikta HfO₂ sluoksniui, užgarintam ant kvarcinio stiklo padėkliuko (žr. 12 pav.). Bandinio struktūra buvo indentifikuota atliekant spektrų tinkinimą WINDF programa, remiantis jungtine protonų ir ličio jonų RBS spektrų analize. Nustatyta, kad ant kvarcinio stikliuko buvo užgarinta 1470 TFU storio sluoksniu, sudarytas iš 93,6 % HfO₂ ir 6,4 % argono atomų. Tokia bandinio struktūra buvo skaitiškai modeliuota SIMNRA ir GEANT4 programiniuose paketuose. Pilnutinis protonų atgalinės sklaidos spektras (žr. 12 pav. a) gerai atitinka eksperimentinę kreivę energijos diapazone 0,3 – 1,9 MeV: χ^2 vertės yra mažesnės už 1, išskyrus šiek tiek didesnę GEANT4 χ^2 vertę. Vidutinės energijos (1,2 – 1,75 MeV) intervale (žr. 12 pav. b) SIMNRA ir WINDF spektrai puikiai atitinka eksperimentinę kreivę – χ^2 vertė dar labiau priartėja prie 1, o GEANT4 kreivės χ^2 vertė yra didesnė dėl įvertinto didesnio deguonies krašto intensyvumo, lyginant su SIMNRA ir WINDF spektrais. Didelės energijos intervale (1,79 – 1,9 MeV) visų skaitiškai modeliuotų spektrų χ^2 vertė yra didelė, tačiau šiuo atveju GEANT4 kreivė labiau atitinka

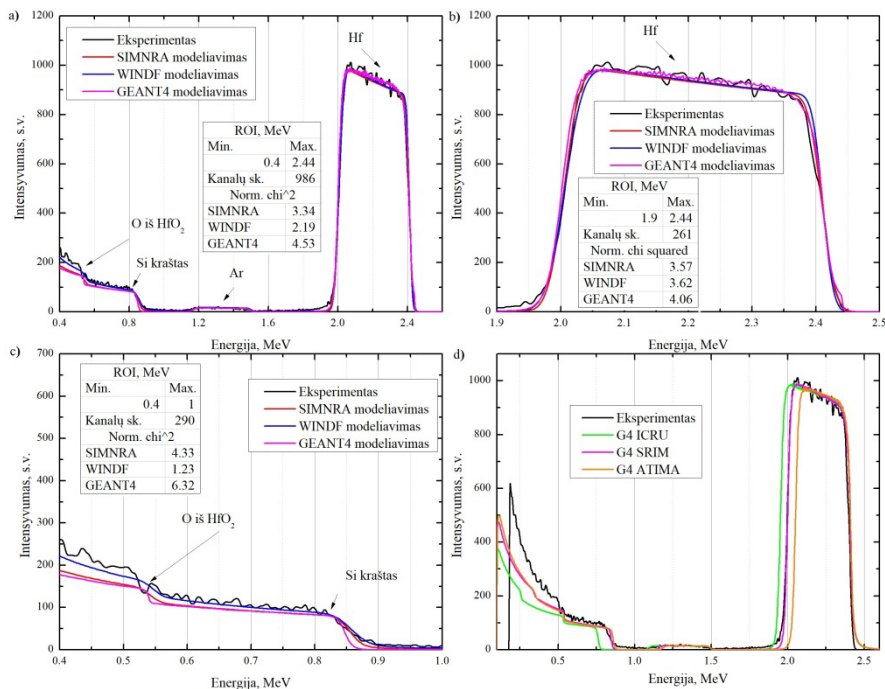
eksperimentinius rezultatus (dėl mažesnės χ^2 vertės) nei SIMNRA ir WINDF kreivės (žr. 12 pav. c). SIMNRA įrankiu gauta kreivės maksimumo energinė pozicija atitinka geriausiai, kai tuo tarpu WINDF ir GEANT4 smailių maksimumai pasistūmę per 1,5 keV į aukštesnių energijų pusę.



12 pav. Protonų atgalinės sklaidos spektrai nuo HfO₂/SiO₂ bandinio: a) pilnutinis spektras; b) vidutinės energijos intervalas; c) didelės energijos intervalas.

Skaitiškai modeliuoti pilnutiniai ličio jonų atgalinės sklaidos spektrai taip pat gerai atitinka eksperimentinį spektrą (žr. 13 pav. a). Šiuo atveju GEANT4 aplinkoje detektoriaus energinės skyros FWHM buvo apskaičiuojamas pagal formulę (26), kadangi tikroji eksperimentinė vertė nebuvo įvertinta. Visų skaitiškai modeliuotų kreivių χ^2 vertės yra 2 – 5 intervale. Šie nuokrypiai susiję su 2 priežastimis: spektrų neatitikimas žemos energijos srityje ir eksperimentinio spektro triukšmo lygis. Pirmoji priežastis puikiai stebima 13 pav. c., kur SIMNRA spektrai buvo simuliuoti be daugkartinės dalelių sklaidos, o WINDF ir GEANT4 spektrai buvo skaitiškai modeliuoti su daugkartine sklaida. GEANT4 kreivės atveju perėjimai ties deguonies ir silicio kraštais yra statesni nei WINDF ir SIMNRA atvejais. To priežastys galėtų būti mažesnė teorinė detektoriaus FWHM vertė arba papildomai neįskaityta energijos sklaida. Skaitiškai modeliuota Hf smailė

(žr. 13 pav. b) gerai atitinka eksperimentinę kreivę visiems naudotiems metodams. Didesnė GEANT4 kreivės χ^2 vertė yra susijusi su skaitiškai modeliuoto spektro triukšmingumu (neapibrėžtimis).



13 pav. Ličio atgalinės sklaidos spektrai nuo HfO₂/SiO₂ bandinio: a) pilnutinis spektras; b) didelės energijos intervalas; c) mažos energijos intervalas; d) skirtingų stabdomųjų gebų panaudojimas GEANT4 modelyje.

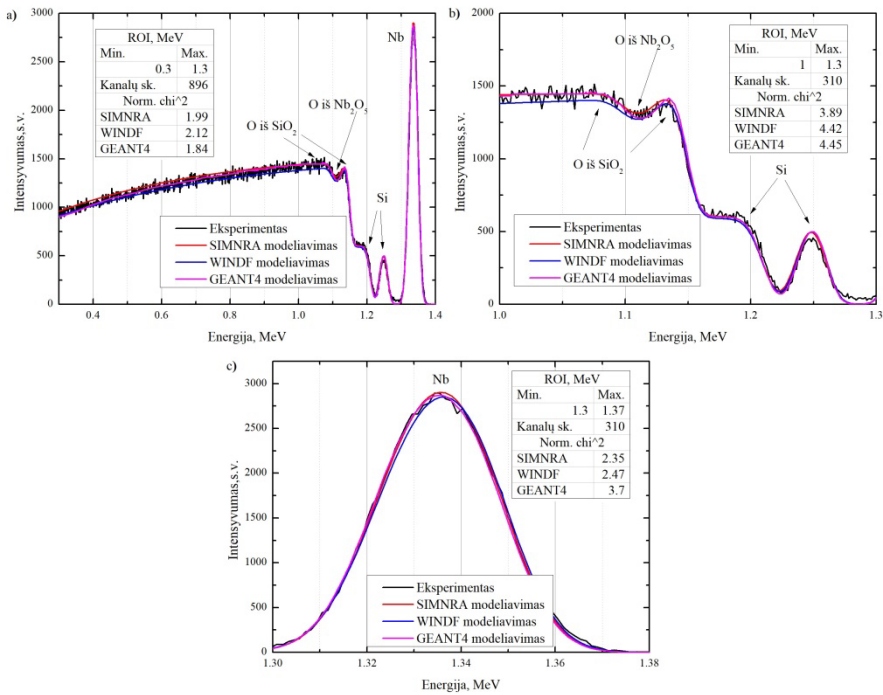
Skirtingų stabdomųjų gebų bibliotekų įtaka atgalinės sklaidos spektrui pateikta 13 pav. d. GEANT4 aplinkoje buvo panaudotos ICRU, SRIM ir ATIMA stabdomųjų gebų duomenų bazės. Pažymėtina, kad naudojant ICRU stabdomąsias gebas gaunama stipriai išplatėjusi Hf smailė, o žemos energijos Si kraštas yra visiškai kitoje energinėje pozicijoje (~750 keV), nei eksperimentinis kraštas (~850 keV). Tai susiję su didesne stabdomąja geba (žr. 4 pav.): naudojant ICRU biblioteką ličio jonų stabdomoji geba HfO₂ medžiagoje yra iki 50 % didesnė, nei pagal SRIM bibliotekos duomenis. Dėl didesnio energijos praradimo praeinant tą patį medžiagos storį atgalinės sklaidos spektras, gautas naudojant ICRU biblioteką, išsiplėčia į žemesnių energijų pusę. Naudojant ATIMA biblioteką Hf smailė yra siauresnė dėl mažesnės stabdomosios gebos 1,5 – 3 MeV intervale. Taip pat pastebimas ir nežymus (~ 15 keV) Si kraštą atitinkančios energinės pozicijos pasistūmimas link aukštesnių energijų. Naudojant ICRU biblioteką geriausiai eksperimentinį atitinkantis spektras gaunamas skaitiškai modeliuojant

1320 TFU HfO₂ sluoksni, kuris skiriasi nuo 1470 TFU, gauto remiantis SRIM biblioteka ličio jonams. Protonų atgalinės sklaidos skaitinis modeliavimas rodo, kad labiausiai eksperimentą atitinkantis HfO₂ sluoksnio storis yra 1470 TFU, todėl jonų atgalinės sklaidos simuliacijose tikslingiau naudoti SRIM stabdomąsias gebas.

2.9.6. Protonų atgalinė sklaida nuo SiO₂/Nb₂O₅/FS SiO₂ bandinio

GEANT4 atgalinės sklaidos modelio patikimumas buvo patikrintas skaitiškai modeliuojant ir eksperimentiškai matuojant kompleksinį SiO₂/Nb₂O₅/FS SiO₂ bandinį (žr. 14 pav. a). Šiuo atveju spektrų skaitiniam modeliavimui ir rezultatų interpretavimui ypatingai svarbus tinkamas stabdomosios gebos bibliotekos pasirinkimas, nes Nb₂O₅ optinė danga yra po SiO₂ sluoksniu. Niobio smailė gerai simuliuojama visų metodų (žr. 14 pav. c), tačiau GEANT4 spektre gaunama didesnė χ^2 vertė. Pagrindinė to priežastis yra prastesnis didelės energijos krašto modeliavimas lyginant su kitais metodais. Vertinant WINDF spektrą, χ^2 vertė didėja dėl Nb smailės energinio centro pasistūmimo per 1 keV į aukštesnių energijų sritį, o SIMNRA metodu gaunamas didesnis smailės intensyvumas. Dėl didelio spektrų intensyvumo šioje energijos srityje stipriai didėjančią χ^2 vertę lemia eksperimentinio spektro triukšmai bei nežymūs teorinių spektrų neatitikimai jam dėl stabdomųjų gebų.

Vidutinės energijos srityje (žr. 14 pav. b) skaitinio modeliavimo tikslumas yra pakankamai geras: energinės smailių pozicijos gerai atitinka eksperimentines, o teorinių kreivių intensyvumas mažai skiriasi nuo eksperimentinių duomenų. Šiame energijų diapazone GEANT4 spektre stebimas statesnis deguonies frontas iš paviršinio SiO₂ ir mažesnis deguonies signalo intensyvumas iš Nb₂O₅ sluoksnio. Žemų energijų spektro sritis, kurios pagrindinis signalas yra atgalinė sklaida iš SiO₂ padėklo, taip pat simuliuojama gerai. Lyginant pilnutinio atgalinės sklaidos spektro χ^2 vertes tarp skaitinio modeliavimo metodų rezultatų gaunama, kad šiuo atveju eksperimentinį spektrą geriausiai atitinka GEANT4 modeliu gautas teorinis spektras.



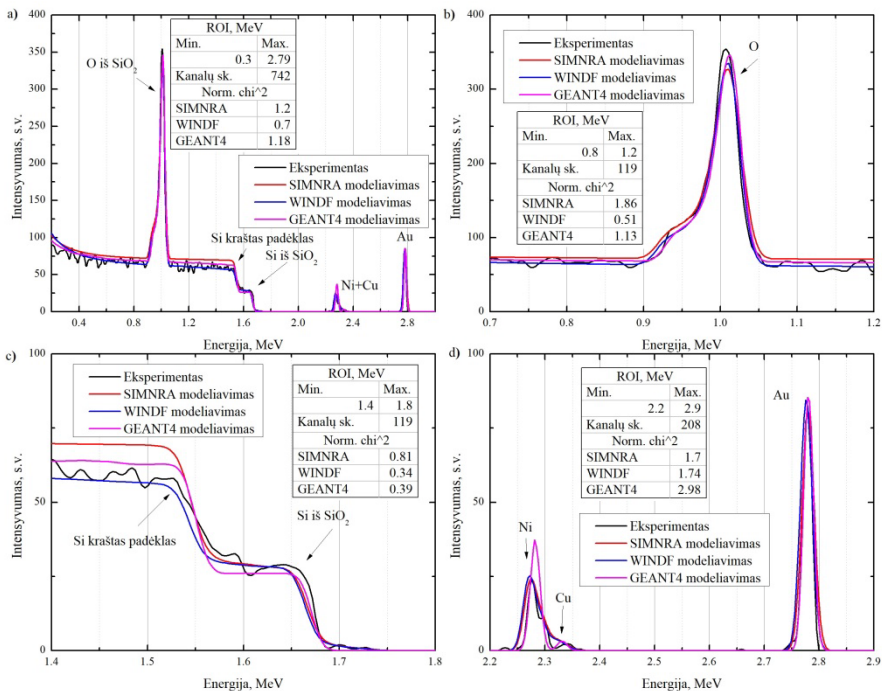
14 pav. Protonų atgalinės sklaidos spektrai nuo SiO₂/Nb₂O₅/FS SiO₂ bandinio: a) pilnutinis RBS spektras; b) vidutinės energijos ruožas; c) didelės energijos ruožas.

2.9.7. He⁺ atgalinė sklaida nuo Au/Ni/SiO₂/Si bandinio

GEANT4 modelio patikimumas skaitiškai modeliuojant kompleksines struktūras buvo įvertintas lyginant teorinius ir eksperimentinius He⁺ atgalinės sklaidos spektrus. Šiuo atveju eksperimentinis spektras buvo adaptuotas pagal [88] šaltinį. Pilnutinis spektras gerai skaitiškai modeliuojamas visais paketais – χ^2 vertės artimos ar mažesnės nei 1 (žr. 15 pav. a). Mažos energijos intervale (žr. 15 pav. b) eksperimentinė deguonies smailė yra intensyvesnė, nei skaitiškai modeliuojama. Taip pat pastebimas GEANT4 kreivės postūmis į didesnių energijų pusę. Tai gali būti susiję su neteisingai pasirinktais detektoriaus energinės skyros ir krintančiųjų dalelių energijos parametrais, arba teorinių atgalinės sklaidos skerspjūvių neatitikimas.

Vidutinės energijos intervale (žr. 15 pav. c) Si signalų frontų energinės pozicijos puikiai skaitiškai modeliuojamos visais metodais, tačiau egzistuoja žymus amplitudžių skirtumas, kai vertinamas Si signalų iš SiO₂ sluoksnio ir Si padėklo junginys (< 1,55 MeV). Pagrindinės šių skirtumų priežastys gali būti modeliujama detektoriaus energinė skyra ir skirtumai tarp stabdomųjų gebų. WINDF ir SIMNRA skaičiavimuose buvo naudota nekintanti

detektoriaus energinės skyros vertė, o GEANT4 metodu buvo naudotas detektoriaus energinės skyros skaičiavimo algoritmas (žr. skyrių 2.7). Galima pastebėti, kad GEANT4 spektre matomi statesni frontų kilimai, kurie gali atsirasti dėl modeliavime naudotos mažesnės energinės skyros vertės arba nepakankamai tiksliai įvertintos energijos sklaidos: paviršiaus netolygumai, papildomi sklaidos mechanizmai (pvz., dviguba sklaida (angl. *plural scattering*)), bei kiti efektai, į kuriuos neatsižvelgiama.



15 pav. He^+ jonų atgalinės sklaidos spektrai nuo Au/Ni/SiO₂/Si bandinio: a) pilnutinis spektras; b) žemos energijos intervalas; c) vidutinės energijos intervalas; d) aukštos energijos intervalas. Eksperimentinis spektras adaptuotas pagal [88] šaltinį.

Didelės energijos intervale (žr. 15 pav. d) matomos Au ir Ni signalų smailės. Pagal [88] šaltinį, nikelio sluoksnyje yra maždaug 10 % vario, kuris lemia didelės energijos uodegą ties 2,3 MeV. GEANT4 metodu gautos Ni smailės intensyvumas yra didesnis nei eksperimentinės kreivės. Šiuo atveju pagrindinė priežastis yra detektoriaus energinė skyra. WINDF ir SIMNRA kreivėse nestebima atskira Cu smailė, tačiau eksperimentiniame ir GEANT4 modeliu gautuose spektruose vario smailė atskiriama. Atsižvelgus į Au smailę eksperimentinės kreivės intensyvumas puikiai modeliuojamas visais metodais, tačiau didesnės energijos kraštai neviseškai atitinka eksperimentinės kreivės pozicijos.

2.10. GEANT4 atgalinės sklaidos modelio rezultatų apibendrinimas

Šio darbo metu sukurtas GEANT4 modelis puikiai skaitiškai modeliuoja protonų ir alfa dalelių atgalinės sklaidos skerspjūvius. Kadangi skerspjūvių skaičiavimuose remiamasi ne Rezerfordinių skerspjūvių vertėmis, skaitiškai modeliuojamo spektro patikimumas priklauso nuo naudojamų išorinių bibliotekų, tokių kaip SigmaCalc, skerspjūvių patikimumo. Daugumoje atvejų teoriniai reakcijų skerspjūviai atitinka eksperimentinius duomenis ir skaitiškai modeliuojami spektrai gerai sutampa su eksperimentiniais. Papildomą neapibrėžtį teoriniuose spektruose daro stabdomųjų gebų netikslumai. Protonams ir alfa dalelėms stabdomųjų gebų skirtumai tarp numatytosios GEANT4 ir standartinės SRIM bibliotekų yra sąlyginai nedideli, tačiau sunkesniems jonams (pvz., Li) stabdomųjų gebų vertės gali stipriai skirtis naudojant skirtingas bibliotekas ir teoriniai spektrai taip pat skirsis ženkliai. Darbo metu ličio jonų stabdomosios gebos buvo įvertintos naudojant ICRU, ATIMA ir SRIM stabdomųjų gebų bibliotekas ir gauti iki 40 % skirtumai tarp verčių. Toks skirtumas lemia didesnę nei 10 % nuokrypį vertinant bandinio sluoksnių pasiskirstymą, todėl tiksliam spektrų skaitiniam modeliavimui būtina pasirinkti eksperimentines sąlygas atitinkančias stabdomųjų gebų bibliotekas. Kai ličio jonų energija mažesnė nei 3 MeV tikslingiau naudoti SRIM stabdomąsias gebas.

Šio darbo metu sukurtame GEANT4 atgalinės sklaidos modelyje lengva įterpti naujas stabdomosios gebos vertes sunkesniems jonams, todėl galima detalesnė ir tikslesnė spektrų analizė priklausomai nuo bandinio sudėties.

Nustatyta, kad skaitiškai modeliuojant plonus medžiagos sluoksnius būtina atsižvelgti į dalelių žingsnių dydį. Kai dalelių žingsnio dydis yra didesnis už medžiagos sluoksnio storį, atgalinės sklaidos intensyvumas iš to sluoksnio stipriai sumažėja dėl mažos statistinių įvykių imties. Norint tiksliai modeliuoti atgalinės sklaidos signalą iš plono medžiagos sluoksnio būtina apriboti dalelės žingsnio dydį iki daugiau nei 10 kartų mažesnio, nei sluoksnio storis.

Lyginant eksperimentinius ir skaitiškai modeliuotus spektrus nustatyta, kad GEANT4 modelis puikiai skaitiškai modeliuoja protonų, helio ir ličio jonų atgalinės sklaidos spektrus tiek nuo paprastų bandinių (kvarcinis stiklas SiO_2), tiek ir daugiasluoksnių optinių dangų ($\text{SiO}_2/\text{Nb}_2\text{O}_5/\text{FS SiO}_2$). Palyginimų metu gauta, kad šis modelis gaunamų rezultatų tikslumu prilygsta komerciniams įrankiams ir gali būti sėkmingai toliau tobulinamas naudojant įvairias tikslesnes išorines duomenų bazes bei eksperimentinius rezultatus.

3. Dalelių kanaliavimo modelis GEANT4 programinio paketo aplinkoje

Šioje dalyje apibūdinamas dalelių kanaliavimo skaitinio modelio GEANT4 aplinkoje algoritmas, apibūdinami vertinime naudoti programiniai paketai, apibrėžiami pagrindiniai originalaus dalelių kanaliavimo modelio pataisymai. Rezultatų skiltyje pateikiama temperatūros įtaka kristalo potencialo pasiskirstymams, taip pat palyginamas originalus ir modifikuotas GEANT4 modeliai bei parodomi pagrindiniai ypatumai naudojant skirtingus dalelių žingsnio dydžius. Rezultatai užbaigiami palyginant teorines ir eksperimentines protonų ir deuteronų efektyviausias stabdomąsias gebas įvertintas silicio, galio arsenido ir germanio kristaluose dalelėms kanaliuojant.

3.1. Kristalinių charakteristikų vertinimas ECHARM paketu

Norint atlikti dalelių kanaliavimo skaitinį modeliavimą GEANT4 aplinkoje, būtina parengti kristalų savybes apibūdinančius įvesties failus. Šio darbo metu orientuotų kristalų elektrinių charakteristikų vertinimui buvo naudotas ECHARM programinis paketas [91]. Pakete skaičiavimo algoritmas remiasi klasikinių fizikos lygčių sprendimu ir periodinių funkcijų skleidimu *Fourier* eilute. Paketu įvertinami vienmačiai ir dvimačiai fizikinių charakteristikų pasiskirstymai išilgai tam tikros kristalinės gardelės ašies: kristalo potencialas, elektronų ir branduolių tankių pasiskirstymas, elektrinio lauko komponentės. Kristalinių parametrų apskaičiavime atliekami šie žingsniai:

1. Nurodomos fundamentinės atomų savybės – krūvio ir masės skaičiai, *Debye* temperatūra, vidutinė jonizacijos konstanta ir formos faktorius (*Moliere* arba eksperimentinis);
2. Modeliuojama gardelė. Gardelė gali būti sukurta pagal standartines (BCC, FCC, deimato ir kt.) arba visiškai naujai – nurodant atomų pozicijas ir kampus primityviajame narvelyje;
3. Nurodomi pagrindinės kristalinės krypties *Miller* indeksai ir 2 statmenų plokštumų *Miller* indeksai;
4. Nurodoma, kokias charakteristikas apskaičiuoti. Taip pat šiame etape galima skaitiškai modeliuoti dalelių kanaliavimą ECHARM aplinkoje.

Šio darbo metu kristalinės charakteristikos buvo įvertintos silicio kristalui išilgai <001>, <110> ir <111> kristalinių ašių temperatūrų intervale nuo 100 K iki 1400 K. Charakteristikų vertinimui buvo naudojamos dvi *Debye* temperatūros – 640 K (gauta iš šiluminės talpos matavimų [92]) ir 490 K (gauta iš kanaliavimo eksperimentų [93]). Taip pat buvo įvertintos germanio ir galio arsenido kristalų charakteristikos išilgai <110> ir <111> ašių 300 K ir 800 K temperatūrose. *Debye* temperatūros šiems kristalams kambario temperatūroje [94]: 400 K germanio atomams, 240 K galio atomams ir 275 K arseno atomams. Viena iš pagrindinių dalelių kanaliavimui svarbių kristalinių charakteristikų, kuri kinta didėjant temperatūrai, yra atomų virpesių amplitudė. Jos vertė gaunama sprendžiant [95]:

$$\langle A^2(t) \rangle = \frac{9h^2T(\varphi(x) + \frac{x}{4})}{4\pi^2MkT_D^2}, x = \frac{T_D}{T}, \quad (29)$$

čia h – *Planck* konstanta, k – *Boltzmann* konstanta, T – temperatūra, M – vidutinė atominė masė, T_d – *Debye* temperatūra, o $\varphi(x)$ yra *Debye* integralas:

$$\varphi(x) = \frac{1}{x} \int_0^x \frac{tdt}{e^t - 1}. \quad (30)$$

Skaitinio modeliavimo metu naudotos gardelių konstantos: 5,431 Å silicio, 5,6575 Å germanio ir 5,653 Å galio arsenido kristalams.

3.2. Dalelių kanaliavimo skaitinis modeliavimas GEANT4 aplinkoje

Pirmą kartą kanaliavimo modelis GEANT4 aplinkoje buvo implementuotas su 10.3 versija, kai į paketą buvo pridėta kristalinių struktūrų klasė [24]. Originalus kanaliavimo modelis buvo skirtas labai didelės energijos dalelių (400 GeV/c protonai) kanaliavimui tiesiuose ir lenktuose kristaluose. Modelyje prie standartinės medžiagų klasės *G4Material* buvo integruota išplėstinė klasė *G4Extendedmaterial*, kuri leidžia naudoti kristalinių struktūrų savybes. Fizikiniam kanaliavimo procesui buvo sukurta dedikuota klasė, o fizikinių procesų modifikavimui buvo skirtos *wrapper* klasės. Pastarosios, iš esmės, yra fizikinių procesų klasės, tik jose papildomai modifikuojamas procesų sąveikos atstumas pagal momentinę dalelės pozicijoje esančius branduolių ir elektronų tankius. Pradedant GEANT4 versija 10.6, kanaliavimo modelyje *wrapper* klasės yra pakeistos skerspjūvio modifikavimo procesais, tačiau atliekant skaitinius modeliavimus pastebėtas netinkamas procesų vertinimas. Kanaliuojančių dalelių energijos nuostoliai buvo tokie, tarsi dalelės sąveikautų su amorfinė

medžiaga, nors kanaliavimo sąlygos buvo tenkinamos. Dėl šio neatitikimo modelis buvo modifikuotas grąžinant senąsias *wrapper* klases, su kuriomis energijos nuostoliai skiriasi nuo amorfinių atvejų. Didelės energijos ($> 1 \text{ MeV}$) jonų energijos nuostoliai ir stabdymas medžiagose priklauso nuo lokalaus elektronų tankio išilgai dalelės judėjimo kelio (žr. formulę (1)). Dalelės, kurios kanaliuoja, sklinda tarsi 2D potencinėje duobėje. Jeigu dalelė sklinda tarp atomų ašių, kur yra mažiausia elektronų ir branduolių koncentracija, gaunami mažesni energijos nuostoliai, nei sąveikaujant su amorfine medžiaga. Tačiau kai dalelės priartėja prie atomų ašių, kur lokalūs elektronų ir branduolių tankiai yra didesni, energijos nuostoliai padidėja. Normalizuoti amorfinių medžiagų elektronų ir branduolių tankiai lygūs 1 ir nepriklauso nuo dalelės pozicijos medžiagoje. Naudojant kanaliavimo modelį kristalinėse medžiagose, ši vertė padalinama į santykinai didelius elektronų ir branduolių tankius prie atomų grandinių, ir santykinai mažus lokalius tankius kanalų viduje. Tokiu būdu vidutinė tankių vertė plokštumoje vis vien lieka lygi 1, tačiau labai priklauso nuo dalelės momentinės pozicijos. Dalelei kanaliuojant, jos energijos nuostoliai priklausys nuo tankio integralo išilgai dalelės trajektorijos, todėl kuo daugiau laiko dalelė praleidžia kanalo centre, kur tankiai santykinai maži, tuo mažesni jos energijos nuostoliai.

Antroji modelio modifikacija buvo kritinio kanaliavimo kampo sąlygos įskaitymas. Atliekant skaitinio modeliavimo procedūrą, prieš dalelei kertant bandinio paviršių, tikrinama, ar medžiaga yra amorfinė, ar kristalinė. Jei medžiaga amorfinė, kanaliavimo procesas nevykdomas. Jei medžiaga kristalinė, krintančiosios dalelės pozicija atsitiktinai generuojama plokštumoje, statmenoje kanaliavimo ašiai. Originaliame GEANT4 11.0 modelyje kritinio kanaliavimo kampo sąlyga yra nevertinama. Šio darbo metu modelis buvo modifikuotas, implementuojant sąlygą pagal nelygybę (13), kai atliekamas dalelės momento krypties ir kristalinės ašies kampo vertinimas bei lyginama su teoriniu kanaliavimo kampu dalelės energijai. Jeigu krintančios dalelės kampas su kristaline ašimi yra mažesnis už kritinį, kanaliavimo procesas yra vykdomas. Jeigu kampas yra didesnis nei kritinis, kanaliavimo procesas nutraukiamas ir išsaugoma paskutinė dalelės kanaliavimo pozicija kristalinėje ir laboratorinėje atskaitos sistemose. Nuo šio žingsnio dalelės sąveika vykdoma su amorfine medžiaga. Jei kritinio kampo sąlyga tolimesniuose dalelės žingsniuose vėl tampa patenkinama, dalelės pozicija vėl generuojama plokštumoje, statmenoje kristalinei ašiai. Šiuo atveju generuojama ne atsitiktinė pozicija, o prie paskutinės kanaliuotos pozicijos pridodamas laboratorinės atskaitos sistemos pozicijų skirtumas (paskutinės kanaliavimo ir dabartinės). Tokiu atveju užtikrinama, kad

kanaliuojanti dalelė gali nebekanalijuoti, bet po kurio laiko, kai tenkinamos sąlygos, grįžti į kanaliavimo režimą.

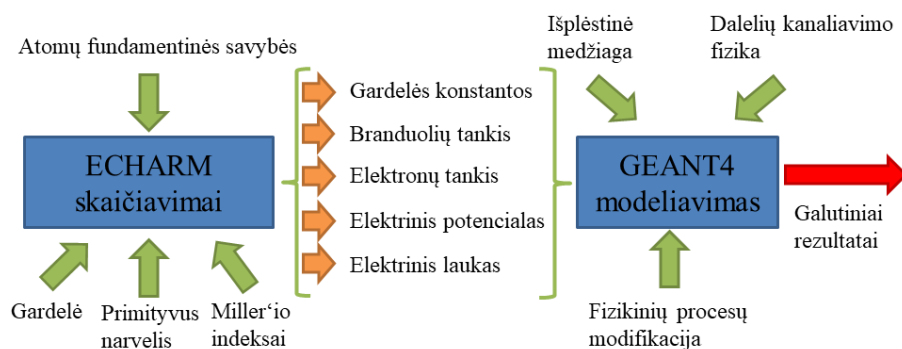
Kanaliavimo procesas GEANT4 modelyje susideda iš kelių etapų. Prieš atliekant dalelės žingsnį yra skaičiuojamas žingsnio dydis, fizikinio proceso reakcijos skerspjūvis, dalelės judėjimo kryptis, energijos nuostoliai ir kt. parametrai. Kanaliavimo atveju, prieš atliekant žingsnį pirmiausia atliekama patikra, ar medžiaga yra kristalinė. Jeigu medžiaga yra kristalinė ir tenkinama kritinio kanaliavimo kampo sąlyga, dalelės momentas laboratorinėje atskaitos sistemoje yra perskaičiuojamas į momentą kristalinėje atskaitos sistemoje. Pagal dalelės poziciją kristalinėje plokštumoje ir jos momentą pirminiame žingsnyje n skaičiuojama pozicija ir momentas po kanaliavimo įvykio kitame žingsnyje $n+1$. Diferencialinė dalelės judėjimo lygtis gali būti išreiškiama $\frac{dy}{dx} = f(x, y)$ forma, kur y yra nežinomasis narys (dalelės pozicija, momentas) pozicijoje x . Tokią diferencialinę lygtį galima spręsti naudojantis 4 eilės *Runge–Kutta* metodu [96], [97]:

$$\begin{aligned}
 k_1 &= f(x_n, y_n), \\
 k_2 &= f\left(x_n + \frac{h}{2}, y_n + h \frac{k_1}{2}\right), \\
 k_3 &= f\left(x_n + \frac{h}{2}, y_n + h \frac{k_2}{2}\right), \\
 k_4 &= f(x_n + h, y_n + h k_3), \\
 y^{n+1} &= y^n + \frac{1}{6} h (k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4), \\
 x_{n+1} &= x_n + h,
 \end{aligned}
 \tag{31}$$

čia y^{n+1} ir y^n funkcijos rezultatas tolimesnėje ir dabartinėje iteracijoje (žingsnyje), $k_1 - k_4$ – koeficientai, h yra integracijos žingsnio dydis (angl. *step size*), n yra skaičiavimų iteracija, o x yra kintamasis. Tokiu būdu apskaičiuojami tolimesniame dalelės žingsnyje esantys pozicijos ir momento parametrai. Šie parametrai išsaugojami tolimesniam dalelės judėjimo integravimui. Sekančio žingsnio pozicija naudojama gauti lokalų elektronų ir branduolių tankį fizikinių procesų modifikavimui. Dalelės momento rezultatas konvertuojamas į laboratorinę atskaitos sistemą ir atliekamas fizikinio proceso vertinimas pagal skerspjūvius ir teorinius modelius,

nurodytus GEANT4 klasėse. Toks algoritmas naudojamas sekti kanaliuojančios dalelės poziciją ir momentą kristalo kanale.

Bendras dalelių kanaliavimo skaitinio modeliavimo algoritmas GEANT4 modelyje pateiktas 16 pav.. Pirmiausia atliekamas kristalinės gardelės skaitinis modeliavimas ECHARM programiniu paketu: skaičiuojamos gardelės konstantos (arba atstumas tarp atomų grandinių), elektronų ir branduolių tankių pasiskirstymai, kristalo elektrinio potencialo pasiskirstymas ir elektrinio lauko komponentės plokštumoje, statmenoje kanaliavimo ašiai. Šie parametrai naudojami GEANT4 modelyje dalelių kanaliavimo simuliacijoms. Skaitinio modeliavimo metu silicio, germanio ir galio arsenido kristalai buvo skaitiškai modeliuojami kaip NIST medžiagos, o masių tankiai buvo $2,33 \text{ g/cm}^3$, $5,323 \text{ g/cm}^3$ ir $5,31 \text{ g/cm}^3$, atitinkamai.



16 pav. Dalelių kanaliavimo proceso skaitinio modeliavimo schema naudojant ECHARM ir GEANT4 kodus.

3.3. Dalelių kanaliavimo skaitinis modeliavimas FLUX7 aplinkoje

GEANT4 modelio rezultatų palyginimui buvo naudojamas populiarus kanaliavimo skaitinio modeliavimo paketas FLUX7 [11]. FLUX7 yra specialių programų kolekcija, skirta skaitiškai modeliuoti dalelių trajektorijas kanaliavimo sąlygomis. Skaičiavimo algoritmai paremti Monte Carlo metodu – naudojama binarinių susidūrimų aproksimacija ir vietoje nepertraukiamų atomų grandinių aproksimacijos modeliuojama tikra kristalinė gardelė. Sklaidai modeliuoti naudojamas ekranuotas *Coulomb* potencialas, o ekranavimo funkcijos gali būti *Moliere*, universali (dar žinoma kaip ZBL) arba *Hartree–Fock*. Šio darbo metu naudotas *Hartree–Fock* potencialas, kuriuo gaunamas geriausias atitikimas eksperimentiniams rezultatams [98]. Darbo metu buvo skaitiškai modeliuojamas praėjusių bandinių dalelių energinis pasiskirstymas. Energijos nuostoliams vertinti FLUX7 įvesties failuose naudojami 2 parametrai – *ELCORE* ir *DEDX VALENCE*. *ELCORE* parametras nurodo energijos nuostolių sandą dėl

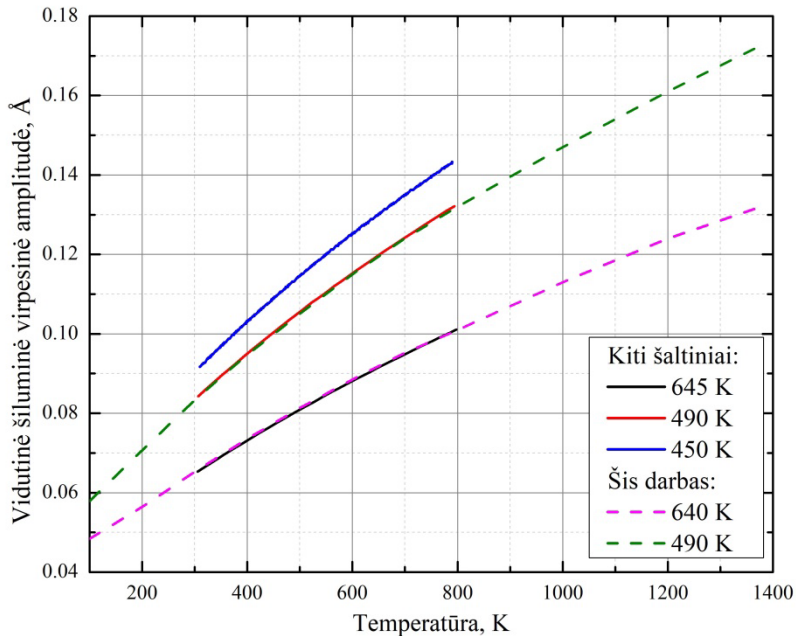
vidinių sluoksnių elektronų kaip funkciją nuo smūgio parametro (angl. *impact parameter*), t.y. atstumo tarp krintančiosios dalelės krypties tiesės ir taikinio branduolio kuriamo potencinio lauko centro. *ELCORE* vertės gaunamos naudojant DETTMAN programą su nurodytais parametrais: krintančiosios dalelės energija, smūgio parametras ir elektronų konfigūracija su ryšio energijomis. Valentinių elektronų sandą nurodo *DEDX VALENCE* parametras. Siekiant nustatyti jo vertę, naudojama FLUXCHK programa. FLUXCHK programa naudojama tikrinant įvesties failą dėl nurodytos gardelės ir energijos nuostolių teisingumo. Dėl vidinių elektronų įtakos įvertinta stabdomoji geba lyginama su SRIM–2013 stabdomąja geba ir gaunamas stabdomosios gebos sandas dėl valentinių elektronų. Įvedus *ELCORE* ir *DEDX VALENCE* parametrus, paleidžiama FLUXCHK programa ir įvertinta pilnutinė stabdomoji geba amorfinėje medžiagoje turi būti lygi SRIM–2013 stabdomajai gebai. Kiti FLUX7 įvesties failo parametrai yra gardelės tipas, gardelės konstantos, kanaliavimo kryptis, *Debye* temperatūra. Skaitiniame modeliavime naudotos tos pačios bandinio ir *Debye* temperatūros, kaip ir GEANT4 aplinkoje. Kiekvienas skaitinis modeliavimas buvo atliekamas su 10 000 dalelių. Atliekant modeliavimus nustatyta, kad FLUX7 paketas turi energijos ir bandinio dydžio apribojimus – didesni nei 100 μm storio bandiniai ir didesnė nei 20 MeV dalelių energija yra nemodeliuojama, todėl kai kuriuose darbe gautuose rezultatuose ir palyginimuose FLUX vertės nepateikiamos.

3.4. Rezultatai

3.4.1. Kristalų charakteristikų įvertinimas

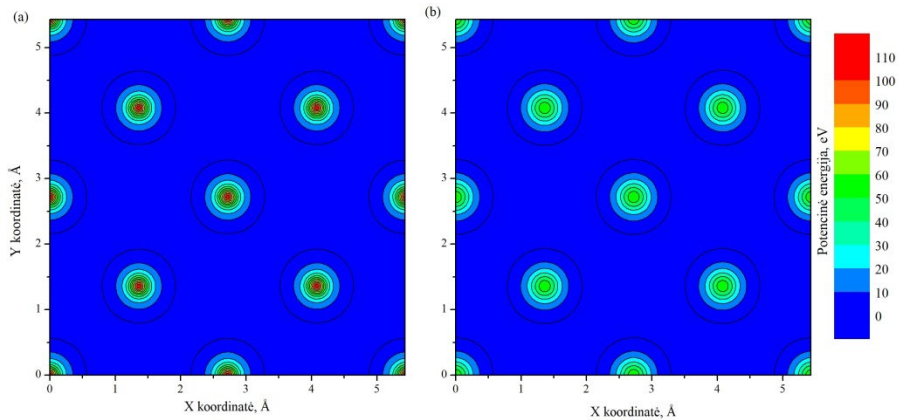
Siekiant įvertinti temperatūros įtaką kanaliuojančių jonų energetiniam pasiskirstymui, buvo įvertinta atomų virpesių amplitudės priklausomybė nuo temperatūros silicio kristale. Vertinant rezultatus naudojamas virpesių amplitudės ir gardelės konstantos santykis R . Silicio gardelės konstanta $a = 5,431 \text{ \AA}$. Esant 100 K temperatūrai vidutinės virpesių amplitudės yra $A = 0,048 \text{ \AA}$ ($R = 0,9 \%$) ir $A = 0,058 \text{ \AA}$ ($R = 1,1 \%$) atitinkamai prie 640 K ir 490 K *Debye* temperatūrų (žr. 17 pav.). Viršutiniame temperatūrų regione, ties 1400 K, amplitudės yra $A = 0,133 \text{ \AA}$ ($R = 2,4 \%$, $T_d = 640 \text{ K}$) ir $A = 0,174 \text{ \AA}$ ($R = 3,2 \%$, $T_d = 490 \text{ K}$). Virpesių amplitudės tose pačiose temperatūrose naudojant skirtingas *Debye* temperatūras skiriasi 18 % ties 100 K ir 27 % ties 1400 K temperatūromis. Šis skirtumo didėjimas augant temperatūrai susijęs su tuo, kad virpesių amplitudė nuo temperatūros priklauso ne tiesiškai (žr. formules (29) ir (30)). Tirtame temperatūrų ruože,

lyginant virpesių amplitudes prie 100 K ir 1400 K, jos padidėja 2,75 karto naudojant $T_d = 640$ K ir 3,01 karto kai $T_d = 490$ K. Gauti rezultatai puikiai atitinka kitų tyrimų rezultatus (žr. 17 pav.).

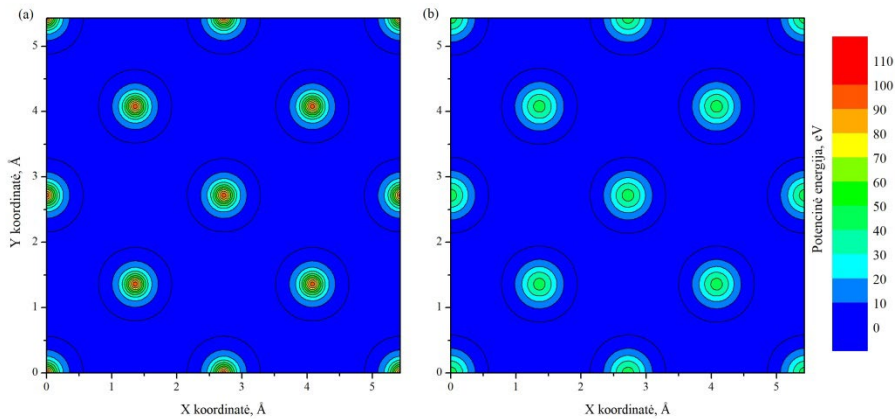


17 pav. Atomų virpesių amplitudžių priklausomybė nuo bandinio temperatūros. Punktyrinė linija žymi šio darbo rezultatus, nenutrūkstanta linija nurodo rezultatus iš kitų šaltinių (adaptuota pagal [95] šaltinį).

Atliekant skaičiavimus ECHARM kodu buvo įvertinta virpesių amplitudžių įtaka gardelės potencialo pasiskirstymui. Potencialų pasiskirstymai išilgai $\langle 100 \rangle$ kristalinės ašies siliciui protonų atveju pateikti 18 pav. ir 19 pav.. Šiuo atveju lygintos didžiausių potencialų verčių priklausomybės nuo temperatūros prie skirtingų *Debye* temperatūrų. Naudojant 640 K *Debye* temperatūrą, bandinio temperatūrai augant nuo 100 K iki 1000 K maksimali potencinės energijos vertė mažėja nuo 106 eV iki 57 eV, t.y. beveik 2 kartus. Virpesių amplitudė ties 1000 K yra $A = 0,113$ Å ($R = 2,1$ %), t.y. 2,35 karto didesnė, nei 100 K atveju. Panaši situacija gaunama kai *Debye* temperatūra yra 490 K (žr. 19 pav.) Šiuo atveju maksimali potencialo vertė sumažėja nuo 95 eV ties 100 K iki 44 eV ties 1000 K. Vidutinė virpesių amplitudė ties 1000 K yra $A = 0,147$ Å ($R = 2,7$ %), t.y. 2,53 karto didesnė. Didėjant bandinio temperatūrai didėja vidutinės virpesių amplitudės dydis. Kadangi virpesių amplitudė riboja artimiausio priartėjimo atstumą (žr. formulė (10)), dėl padidėjusio atstumo mažėja maksimali ašinio tęstinio potencialo vertė (žr. formulė (6)).



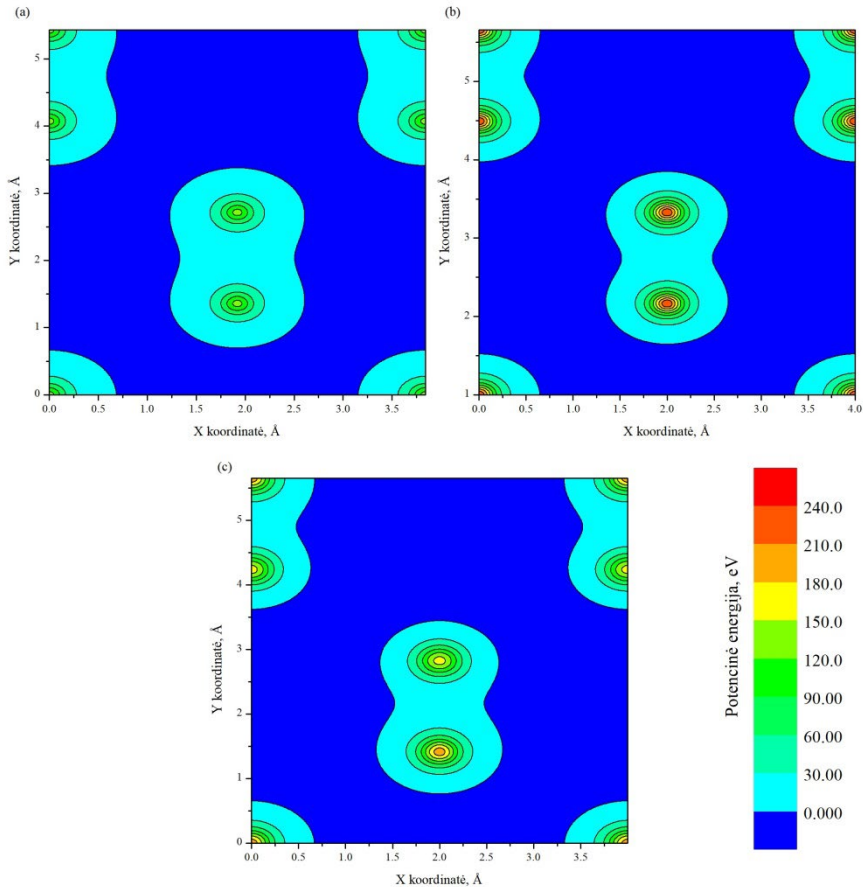
18 pav. Silicio potencinės energijos pasiskirstymas statmenai $\langle 001 \rangle$ ašiai 100 K (a) ir 1000 K (b) temperatūrose. Skaičiavimuose naudota 640 K *Debye* temperatūra.



19 pav. Silicio potencinės energijos pasiskirstymas statmenai $\langle 001 \rangle$ ašiai 100 K (a) ir 1000 K (b) temperatūrose. Skaičiavimuose naudota 490 K *Debye* temperatūra.

Vertinant germanio gardelę, vidutinės virpesių amplitudės buvo $A = 0,087 \text{ \AA}$ ($R = 1,5 \%$, $T = 300 \text{ K}$) ir $A = 0,112 \text{ \AA}$ ($R = 1,9 \%$, $T = 800 \text{ K}$). Skaičiavimuose naudota gardelės konstanta $a = 5,658 \text{ \AA}$. GaAs kristalui amplitudės ties 300 K galio atomams yra $A = 1,052 \text{ \AA}$ ($R = 1,9 \%$) ir arseno atomams $A = 0,902 \text{ \AA}$ ($R = 1,6 \%$), o ties 800 K galio atomams $A = 1,705 \text{ \AA}$ ($R = 3,0 \%$) ir arseno atomams $A = 1,459 \text{ \AA}$ ($R = 2,6 \%$). Skaičiavimuose naudota gardelės konstanta $a = 5,653 \text{ \AA}$. Silicio, germanio ir galio arsenido kristalų potencialų pasiskirstymas išilgai $\langle 110 \rangle$ kristalografines ašies pateiktas 20 pav.. Skirtingiems kristalams maksimalios potencialo vertės skiriasi drastiškai prie tų pačių sąlygų: 130 eV siliciui, 234 eV germaniui ir 197 eV galio arsenidui. GaAs gardelei taip pat pastebimas skirtumas tarp Ga

ir As atomų pozicijų: maksimali vertė siekia 197 eV Ga atomo pozicijoje ir 162 eV As atomo pozicijoje (žr. 20 pav. c) esant 300 K temperatūrai. Kai bandinio temperatūra siekia 800 K, maksimalios potencialo vertės sumažėja iki 95 eV siliciui, 159 eV germaniui ir 126 eV galio arsenidui. Lyginant su 300 K temperatūra, potencialas sumažėja per 31 % siliciui, 38 % germaniui ir 44 % galio arsenidui. Kadangi kritinis kanaliavimo kampas priklauso nuo maksimalios potencialo vertės, didėjant temperatūrai, kartu su potencialu mažėja kritinis kampas ir dalelės turi kristi lygiagrečiau atominėms ašims, kad galėtų kanaliuoti.

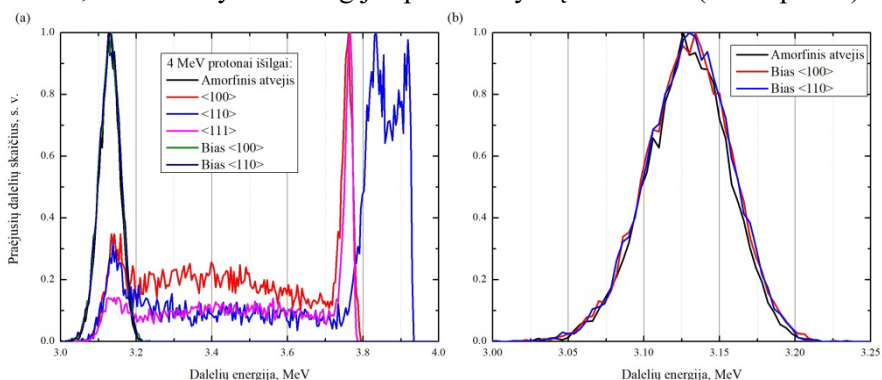


20 pav. Kristalų potencialai 300 K temperatūroje išilgai $\langle 110 \rangle$ ašies: a) siliciui, b) germaniui, c) galio arsenidui. Žingsnio rezoliucija $\sim 0,5$ Å.

3.4.2. Energijos nuostolių ir kritinio kampo validavimas

Šio darbo metu modifikuotas kanaliavimo modelis (su *wrapper* klasėmis) buvo palygintas su nemodifikuotu GEANT4 11.0 versijos kanaliavimo modeliu (su *bias* operatoriais). Skaitinis modeliavimas buvo atliktas 4 MeV

protonams, kanaliuojantiems išilgai $\langle 100 \rangle$, $\langle 110 \rangle$ ir $\langle 111 \rangle$ silicio kristalo ašių. Dalelių pluoštelis krito statmenai bandinio plokštumai, pluoštelio skersmuo 0,01 mm be kampinės skėsties. Bandinys buvo 50 μm storio, didžiausias dalelės žingsnis buvo apribotas iki 4 nm, o kiekvienu atveju skaitiškai modeliuota 20 000 dalelių. Protonų energijos pasiskirstymas atitinka amorfinės medžiagos atvejį, kai naudojamas nemodifikuotas GEANT4 kanaliavimo modelis (žr. 21 pav. b). Kai naudojamas modifikuotas modelis, stebimas žymus energijos pasiskirstymų skirtumas (žr. 21 pav. a).

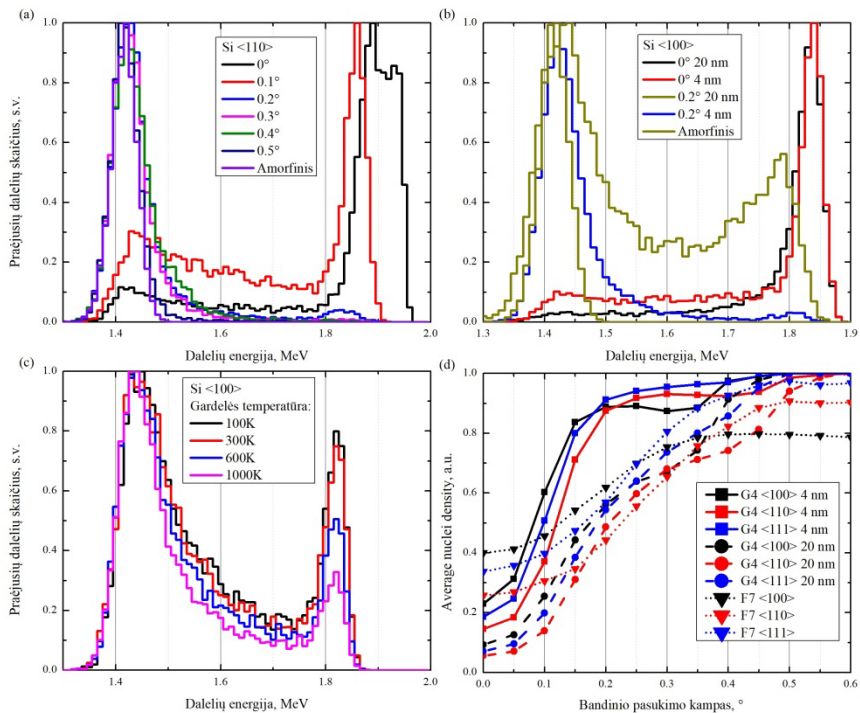


21 pav. (a) 50 μm storio silicio kristalą praėjusių protonų energijos pasiskirstymas išilgai nurodytų kristalografinių ašių; (b) palyginimas tarp amorfinės medžiagos atvejo ir nemodifikuoto GEANT4 kanaliavimo modelio.

Lyginant dalelių energinius spektrus, gautus modifikuotu modeliu dalelėms kanaliuojant išilgai skirtingų ašių, pastebima, kad $\langle 110 \rangle$ kryptimi kanaliuojančios dalelės praranda mažiau energijos sąveikaujant su bandiniu. Šis faktas eksperimentiškai stebėtas, kai išilgai $\langle 110 \rangle$ ašies kanaliuojančios dalelės turėjo 3 kartus mažesnę neelastinį branduolinių įvykių (branduolių sužadinimo) dažnį lyginant su kanaliavimu išilgai $\langle 111 \rangle$ ašies [99]. Lyginant energinį pasiskirstymą tarp $\langle 111 \rangle$ ir $\langle 100 \rangle$ ašių pastebima, kad smailių energinės pozicijos didelės energijos srityje yra praktiškai vienodos, tačiau egzistuoja intensyvumo skirtumas žemesnėse energijose. Nors skirtumas nedidelis, jis susijęs su skirtingu kanaliavimo efektyvumu, nes skiriasi atstumas tarp atomų, potencialo vertės ir kt. parametrai.

Kritinio kanaliavimo kampo sąlygos validavimui skaitiniai modeliavimai atlikti 2 MeV protonams, kanaliuojantiems išilgai $\langle 100 \rangle$, $\langle 110 \rangle$ ir $\langle 111 \rangle$ ašių 20 μm storio silicio kristale (žr. 22 pav.). Kiekvienu atveju skaitinį modeliavimą sudarė 10 000 dalelių, o žingsnio dydžiai buvo limituoti iki 4 nm ir 20 nm. Bandinys buvo sukamas aplink statmeną pluošteliai ašį tol, kol praėjusių dalelių energinis pasiskirstymas tapdavo lygus amorfinės

medžiagos pasiskirstymui. Teoriniai kritiniai kampai buvo įvertinti pagal formulę (11) naudojant 0,0652 Å silicio virpesių amplitudę ties 300 K temperatūra. Kritiniai kampai yra 0,43° išilgai <100> ašies, 0,51° išilgai <110> ašies ir 0,46° išilgai <111> ašies. Remiantis kreivėmis, praėjusių dalelių energinis pasiskirstymas artėja prie amorfinės medžiagos pasiskirstymo didėjant bandinio pasukimo kampui (žr. 22 pav. a, b). Viršijus kritinį kampą, dalelių energinis spektras lygus amorfinės medžiagos pasiskirstymui.



22 pav. (a) Protonų energijos spektras naudojant skirtingas bandinio orientacijas ir 4 nm žingsnio dydį išilgai <110> Si ašies; (b) išilgai <100> Si ašies naudojant 4 nm ir 20 nm žingsnio dydžius; (c) protonų energijos pasiskirstymai prie skirtingų temperatūrų esant 0,1° bandinio pasukimui; (d) vidutinė artimos sąveikos tikimybė, įvertinta GEANT4 (G4) ir FLUX7 (F7) modeliais.

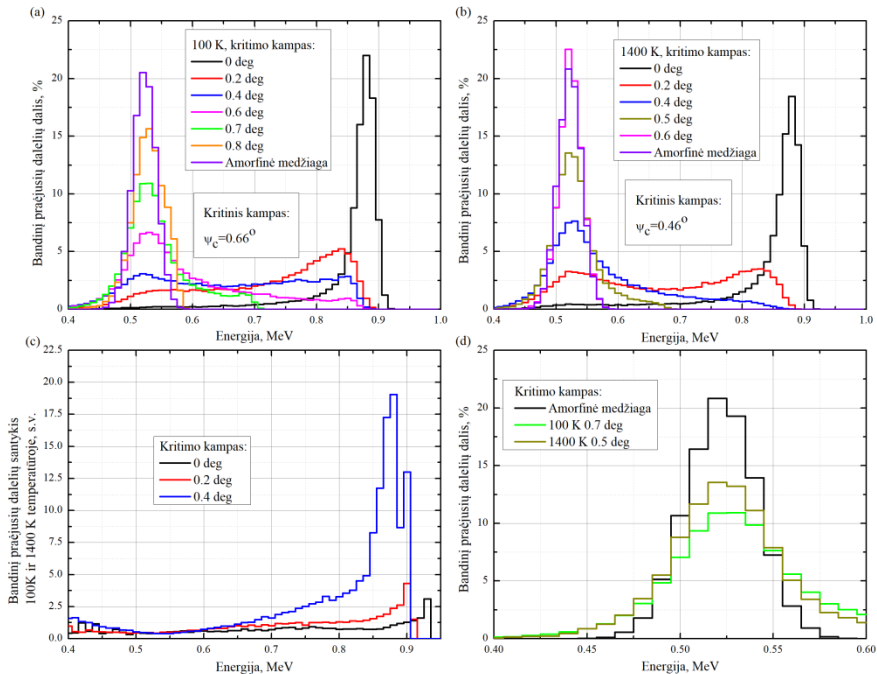
Darbo metu buvo nustatyta, kad kanaliavimo procesas GEANT4 aplinkoje stipriai priklauso nuo dalelės žingsnio apribojimo. Lyginant 4 nm ir 20 nm žingsnių apribojimus, pastebima, kad kai bandinys yra nepasuktas, energinis pasiskirstymas panašus, išskyrus intensyvesnį žemesnės energijos diapazoną 4 nm žingsnio atveju (žr. 22 pav. b). Pasukus bandinį 0,2° kampu nuo <100> kristalografinės ašies, 4 nm žingsnio dydžio energinis pasiskirstymas tampa labai artimu pasiskirstymui nuo amorfinės medžiagos,

su mažai intensyvia didesnės energijos uodega, kai tuo tarpu 20 nm žingsnio dydžio spektre aiškiai stebimas likęs didelis kanaliuojančių dalelių intensyvumas. Šis rezultatas taip pat stebimas ir vidutinio branduolių tankio pasiskirstymuose (žr. 22 pav. d). Naudojant 4 nm žingsnio dydį, artimos sąveikos (dalelės ir taikinio branduolio susidūrimas, angl. *close encounter*) tikimybė stipriai išauga, kai bandinio pasukimo kampas didesnis nei $0,1^\circ$, kai tuo tarpu 20 nm žingsnio dydžio atveju tikimybės padidėjimas nedidelis. Tai susiję su skaitinio modeliavimo specifika: esant mažesniai žingsnio dydžiui dalelės judėjimas arti atomų grandinės yra tiksliau modeliuojamas – dalelė gali priartėti arčiau didesnio elektronų ir branduolių tankio. Kadangi energijos nuostoliai labiausiai priklauso nuo šių tankių, gaunami didesni energijos nuostoliai ir tuo pačiu didesnė artimos sąveikos tikimybė. Vertinant artimos sąveikos tikimybę 20 nm atveju GEANT4 kreivės gerai sutampa su FLUX7 kreivėmis. Pagrindiniai regionai, kur atsiranda skirtumai, yra 0° bandinio pasukimo kampas ir kampas virš kritinio kanaliavimo kampo. Šie neatitikimai gali būti dėl skirtingo gardelių skaitinio modeliavimo algoritmo FLUX7 ir GEANT4 modeliuose: GEANT4 modeliavime naudojamas tęstinis potencialas, o FLUX7 skaičiavimuose naudojamas tikras atomų pasiskirstymas. Dėl tikro atomų pasiskirstymo naudojimo galimas dalelių kanaliavimas kitomis, mažiau ryškiomis kristalinėmis ašimis ir dėl to artimos sąveikos tikimybė pasiekia 1 žymiai toliau nei kritinis kampas.

Kanaliuojančių protonų energijos pasiskirstymo priklausomybė nuo temperatūros silicyje pateikta 22 pav. c. Šiuo atveju pateikti protonų energijos pasiskirstymai, gauti praėjus išilgai $\langle 100 \rangle$ Si ašies bandinį su $0,1^\circ$ pasukimo kampu prie skirtingų temperatūrų. Geriausiai kanaliuojančių (arba mažiausius energijos nuostolius patiriančių) dalelių ($\sim 1,8$ MeV smailė) skaičius beveik nesiskiria 100 K ir 300 K atvejais. Kai temperatūra aukštesnė nei 300 K, tarp energinių pasiskirstymų atsiranda skirtumai – kuo didesnė temperatūra, tuo mažesnis smailės intensyvumas. Didžiausią energiją turinčių dalelių išeigos vertintos pagal šios smailės ploto ir pilno skaitiškai modeliuotų dalelių skaičiaus santykį. 100 K ir 300 K temperatūroje kanaliuojančių protonų dalis siekia, atitinkamai, 21 % ir 22 %. Tuo tarpu prie 600 K temperatūros šis santykis siekia 16 %, o prie 1000 K tik 12 %. Gaunama, kad didėjant bandinio temperatūrai, atomų pozicijos tampa mažiau apibrėžtos dėl šiluminių virpesių, o dėl padidėjusio minimalaus priartėjimo prie atomų atstumo r_{min} (žr. formules (10) ir (6)) mažėja atomų grandinės potencialas ir dalelių kanaliavimo efektyvumas.

Išilgai $\langle 100 \rangle$ ašies 10 μm storio silicio sluoksnį praėjusių 1 MeV protonų energijos pasiskirstymai prie skirtingų bandinio temperatūrų ir pluoštelio

kritimo kampų pateikti 23 pav. Šiuo atveju lygintos 100 K ir 1400 K temperatūros. Kritiniai kanaliavimo kampai, apskaičiuoti naudojant (11) formulę, yra $\psi_c=0,66^\circ$ prie 100 K ir $\psi_c=0,46^\circ$ prie 1400 K temperatūros. Abiem atvejais lygiagrečiai kanaliavimo ašiai krintančių bandinių praėjusių protonų maksimalios energijos smailės yra ties 0,88 MeV, tačiau smailių aukščiai skiriasi nuo 22 % prie 100 K iki 18 % prie 1400 K. Vidutinė dalelių energija 100 K atveju siekia 0,85 MeV, o 1400 K atveju 0,83 MeV, kai tuo tarpu sąveikaujant su amorfinė medžiaga vidutinė dalelių energija yra 0,52 MeV. Dalelių kritimo kampui artėjant prie kritinio, energijos spektrai artėja prie amorfinės medžiagos pasiskirstymo. Kai naudojamas lygiagretus pluoštelis, 100 K temperatūroje gaunama 12 % daugiau dalelių, kurios turi 0,88 MeV energiją lyginant su 1400 K temperatūra. Didinant dalelių kritimo kampą iki $0,2^\circ$, 100 K temperatūroje tokią energiją turinčių dalelių santykis padidėja iki 2,5 karto, o $0,4^\circ$ atveju net iki 13,9 karto lyginant su 1400 K temperatūra.



23 pav. GEANT4 modelių gauti 1 MeV protonų, praėjusių $10 \mu\text{m}$ išilgai $\langle 100 \rangle$ ašies silicyje ties skirtingais kritimo kampais, energijos pasiskirstymai: a) 100 K; b) 1400 K; c) 100 K ir 1400 K temperatūrų bandinius praėjusių dalelių santykis; d) mažos energijos regionas kritimo ties kritiniu kampu 100 K ir 1400 K atvejais.

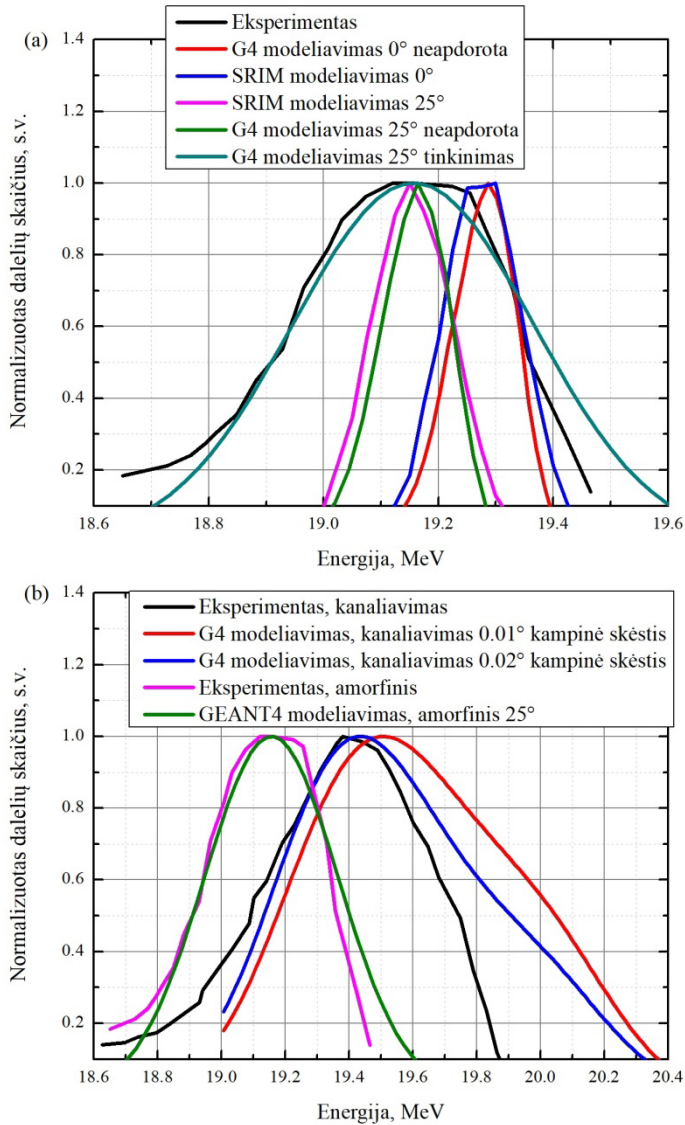
Nežymiai viršijus kritinius kanaliavimo kampus, pasiskirstymuose vis dar stebimas didesnės energijos regionas, kai dalis krintančių dalelių dar

kanaluoja. Tokiu atveju taip pat stebimas žemesnės 0,4 – 0,5 MeV energijos regionas, kuriame kanaliavimo kritiniu kampu kritusių dalelių skaičius yra 15 % (prie 100 K) ir 25 % (prie 1400 K) didesnis nei amorfinės medžiagos atveju (žr. 23 pav. d). Tai susiję su tuo, kad krintančiosios dalelės priartėja arčiau atomų ašių ir yra veikiamos didesnės santykinės elektronų ir atomų koncentracijos, todėl stebimi didesni energijos nuostoliai ir padidėjęs atgalinės sklaidos intensyvumas [4].

3.4.3. Protonų energijos nuostoliai silicyje išilgai $\langle 111 \rangle$ ašies

Protonų energijos nuostolių validavimui, kai dalelės kanaluoja išilgai $\langle 111 \rangle$ ašies silicio kristale, buvo palyginti eksperimentiniai ir skaitinio modeliavimo rezultatai. 20,4 MeV energijos protonai sklido 240 μm storio silicio kristalu ir buvo vertinamas praėjusių dalelių energinis pasiskirstymas. Dėl anksčiau minėtų FLUX7 apribojimų, skaitinis modeliavimas esant tokiai energijai buvo neįmanomas ir rezultatai gauti tik GEANT4 kanaliavimo modeliu. Eksperimentiniai duomenys buvo adaptuoti pagal [100] šaltinį. Šaltinyje pateikiamų energinių pasiskirstymų spektruose horizontalioji ašis pateikiama kaip detektoriaus kanalo numeris. Vidutiniai energijos nuostoliai siekė 0,83 MeV kanaliuojančioms dalelėms ir 1,3 MeV kai sąveikaujama su amorfine medžiaga. Atliekant kanalų – energijos kalibraciją, eksperimentinių spektrų svertinis kanalų numerių vidurkis buvo prilygintas energijos nuostoliams. Vertinant amorfinių medžiagų energijos nuostolius buvo pastebėta, kad tiek GEANT4, tiek SRIM–2013 skaičiavimų metodai pateikia mažesnius energijos nuostolius, nei nurodyta eksperimentiniuose rezultatuose (žr. 24 pav. a). Kai bandinys pasuktas 0° kampu, SRIM–2013 ir GEANT4 kreivės gerai sutampa viena su kita, tačiau eksperimentinės smailės pozicija yra prie žemesnių energijų. Siekiant atitikti kreivių eksperimentinės smailės poziciją buvo atlikta keliasdešimt skirtingų skaitinių simuliacijų. Teorinės smailės geriausiai atitinka eksperimentinės smailės energinę poziciją, kai bandinys pasuktas 25° kampu (t.y. efektyvusis bandinio storis, kurį turi praeiti dalelės, padidėja). Eksperimentinių rezultatų šaltinyje apie bandinio pasukimą ar tai, kaip gautas eksperimentinis amorfinės medžiagos spektras, informacijos nepateikiama. Darant prielaidą, kad silicio kristalas buvo išpjautas taip, kad pluošteliai statmenas paviršius būtų išilgai $\langle 111 \rangle$ kristalinės ašies, bandinį pasukus 25° kampu būtų gaunamas nekanaliuojančių dalelių energinis pasiskirstymas. Eksperimentinių rezultatų šaltinis teigia, kad detektoriaus energinė skyra siekė 0,5 % protonų pluoštelio energijos, o dalelių pluoštelio energijos sklaida buvo 100 keV – 150 keV. Atsižvelgus į šiuos parametrus, skaitiškai modeliuotas dalelių

pasiskirstymas buvo tinkintas Normaliojo pasiskirstymo funkcija su standartiniu nuokrypiu $\sigma = 200$ keV. Eksperimentinis ir skaitiškai modeliuotas energinis pasiskirstymas amorfinės medžiagos atveju sutampa puikiai.



24 pav. Eksperimentiniai ir GEANT4 modeliu gauti energijos pasiskirstymai 20,4 MeV energijos protonams, praėjusiems 240 μm silicio kristalą amorfinės medžiagos (a) ir kanaliavimo (b) atvejais. Eksperimentiniai duomenys adaptuoti pagal [100].

Atliekant skaitinio modeliavimo eksperimentus kanaliuojančių dalelių atveju buvo naudojamas 0° bandinio pasukimo kampas ir $0,01^\circ$ bei $0,02^\circ$

pluoštelio kampinės skėstys. Eksperimentinių rezultatų šaltinis nurodo maksimalią pluoštelio kampinę skėstį $0,01^\circ$. Kristalinių charakteristikų parametrai buvo įvertinti 300 K temperatūros bandiniui naudojant 640 K *Debye* temperatūrą. Skaitinio modeliavimo metu gauta, kad kanaliuojančių dalelių energijos nuostoliai yra mažesni nei eksperimentiniai, o energinio pasiskirstymo smailės pozicija geriausia atitinka skaitiškai modeliuojant $0,02^\circ$ pluoštelio kampinę skėstį (žr. 24 pav. b). GEANT4 kreivės didelės energijos uodega yra žymiai intensyvesnė už eksperimentinę kreivę. Eksperimentinių ir teorinių rezultatų skirtumą lemia: a) neidealios eksperimentinės sąlygos (pvz., pluoštelio energinė sklaida, detektoriaus energinė rezoliucija, kristalo kokybė ir kt.); b) teorinio modelio GEANT4 aplinkoje trūkumai. Kadangi skaitiškai modeliuojant kristalinė gardelė traktuojama kaip ideali, t.y. be defektų, eksperimentiniame kristale esantys defektai lemtų didesnius energijos nuostolius lyginant su teoriniais rezultatais. Skaitinio modeliavimo metu gauti energijos nuostoliai amorfinės medžiagos atveju yra 1,24 MeV, kai tuo tarpu eksperimentiniai rezultatai pateikia 1,3 MeV. Kanaliuojančių dalelių eksperimentiniai energiniai nuostoliai yra 0,83 MeV, kai tuo tarpu skaitinio modeliavimo metu gaunami 0,83 MeV ($0,02^\circ$ pluoštelio kampinė skėstis) bei 0,77 MeV ($0,01^\circ$ kampinė skėstis) energijos nuostoliai. Šaltinis pateikia kanaliavimo ir amorfinės medžiagos energijos nuostolių santykį $K = 0,64 \pm 0,1$. Šio darbo metu gauti santykiai yra 0,66 ($0,02^\circ$ kampinė skėstis) ir 0,62 ($0,01^\circ$ kampinė skėstis). GEANT4 modeliu gauti kanaliuojančių išilgai $\langle 111 \rangle$ silicio ašies dalelių energijos nuostoliai gerai atitinka eksperimentinius rezultatus.

3.4.4. Protonų stabdomosios gebos silicyje išilgai $\langle 111 \rangle$ ašies

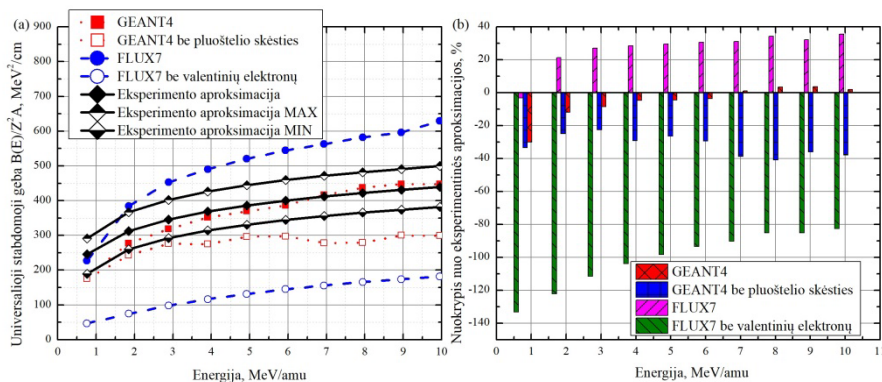
Papildomas palyginimas tarp eksperimentinių ir teorinių energijos nuostolių buvo atliktas protonams, kanaliuojantiems išilgai $\langle 111 \rangle$ ašies silicyje. Eksperimentiniai duomenys buvo adaptuoti pagal [9] šaltinį. Rezultatai šaltinyje pateikiami kaip eksperimentinė efektyvioji stabdomoji geba \bar{B} . Eksperimentinė stabdomoji geba dE/dx medžiagoje:

$$\frac{dE}{dx} = -\frac{C}{E} \ln(bE) = -\frac{B(E)}{E}, \quad (32)$$

čia C ir b yra konstantos, priklausančios nuo medžiagos. Eksperimentinės efektyviosios stabdomosios gebos tokiu atveju gaunamos remiantis:

$$\bar{B} = \frac{1}{x} \int_{E_f}^{E_i} E dE = \frac{E_i^2 - E_f^2}{2\Delta x}, \quad (33)$$

čia E_i ir E_f yra krintančiosios ir išeinančios iš medžiagos dalelės energija, o Δx yra kristalo storis. Eksperimentinių rezultatų šaltinyje pateikiama efektyviųjų stabdomųjų gebų tiesinė aproksimacija, kurios parametrai $C=75,2 \pm 3 \text{ MeV}^2/\text{cm}$ ir $\ln(b)=3,54 \pm 0,55$. Skaitiškai modeliuoto bandinio storis buvo $20 \mu\text{m}$, o skaitinis modeliavimas atliktas $1 - 10 \text{ MeV}$ energijos diapazone 1 MeV žingsniu. Eksperimentinių rezultatų šaltinis teigia, kad pluoštelio kampinė skėstis buvo geresnė nei $0,1^\circ$. Skaitinio modeliavimo metu buvo naudojamas pluoštelis be skėsties, bei su $0,05^\circ$ kampine skėstimi. Naudojant pastarąją buvo gauti labiausiai eksperimentinius atitinkantys rezultatai. FLUX7 skaitiniame modeliavime nebuvo naudojama pluoštelio skėstis, o simuliacijos buvo atliekamos naudojant dvi konfigūracijas: su *DEDX VALENCE* parametru, kuris atsižvelgia į valentinių elektronų indėlį į stabdomąją gebą ir be *DEDX VALENCE* parametru, kai atsižvelgiama į stabdomąją gebą tik dėl vidinių elektronų. Tiek GEANT4, tiek ir FLUX7 atvejais skaitiniai modeliavimai buvo atliekami su 10000 dalelių. Eksperimentinė tiesinė aproksimacija ir skaitinio modeliavimo rezultatai pateikti 25 pav.. Papildomai prie eksperimentinės tiesinės aproksimacijos, kartu pateikta ir minimalios ir maksimalios aproksimacijos vertės, vertinant ar skaitinio modeliavimo rezultatai patenka į eksperimentinių rezultatų aproksimacijos intervalą. Naudojant GEANT4 modelį ir $0,05^\circ$ kampinę skėstį, skaitinio modeliavimo rezultatai beveik idealiai atitinka eksperimentinius – didžiausias $\sim 30 \%$ nuokrypis gaunamas 1 MeV energijos protonams, o vidutinis nuokrypis visame energijų diapazone siekia $\sim 7 \%$. Kai nenaudojama kampinė skėstis, GEANT4 modeliu gautos efektinės stabdomosios gebos yra per $30 - 40 \%$ mažesnės nei eksperimentinės vertės. Pluoštelio kampinė skėstis daro žymią įtaką dalelių energijos nuostoliams, o kartu ir kanaliavimo efektyvumui. FLUX7 rezultatai, priešingai nei GEANT4 rezultatai, rodo žymiai didesnes stabdomąsias gebas, lyginant su eksperimentinėmis vertėmis. Kai atsižvelgiama į valentinių elektronų įtaką, stabdomosios gebos yra vidutiniškai 27% didesnės nei eksperimentinės. Kai neatsižvelgiama į valentinių elektronų įtaką, FLUX7 modeliu gautos stabdomosios gebos yra žymiai mažesnės nei eksperimentinės – vidutiniškai 2 kartus. Tirtame energijų intervale, naudojant GEANT4 modifikuotą kanaliavimo modelį, gaunamos eksperimentus atitinkančios stabdomosios gebos vertės.



25 pav. (a) Universalių stabdomųjų gebų kreivės, gautos protonams kanaliuojant išilgai <111> ašies silicio kristale ir eksperimentinė tiesinė aproksimacija; (b) GEANT4 ir FLUX7 rezultatų nuokrypis nuo eksperimentinės tiesinės aproksimacijos. Eksperimentiniai duomenys adaptuoti pagal [9].

3.4.5. Efektyviųjų stabdomųjų gebų vertinimas germanio kristale

Išplėstinis stabdomųjų gebų palyginimas tarp eksperimentinių ir teorinių verčių buvo atliktas protonams ir deuteronams, kanaliuojantiems išilgai <110> ir <111> kristalografinių ašių germanio kristale. Eksperimentiniai duomenys buvo adaptuoti pagal [101] šaltinį. Eksperimentų metu kampinė pluoštelio skyra buvo geresnė nei $0,2^\circ$, tačiau papildomai naudotas selektyvinis kanalinis detektorius leido atrinkti mažo kampo sklaidą patiriančias ir kanaliuojančias daleles ir vertinti jų stabdomąją gebą. Kanaliavimo skaitinis modeliavimas buvo atliktas naudojant 3 konfigūracijas: 300 K temperatūros bandinys be pluoštelio kampinės skėsties, 800 K temperatūros bandinys be kampinės skėsties ir 300 K temperatūros bandinys su kampine skėstimi. Geriausiai eksperimentinius rezultatus atitinkančiai pluoštelio kampinei skėščiai gauti buvo atlikta keleta skaitinių modeliavimų, tačiau geriausias atitikimas pasiektas su $0,025^\circ$ pluoštelio skėstimi. Rezultatų lentelėse vertės pateiktos naudojant 300 K bandinio temperatūrą ir $0,025^\circ$ pluoštelio kampinę skėstį. Prie eksperimentinių rezultatų lentelėse taip pat pridėtos efektyviosios stabdomosios gebos aproksimacijos vertės, gautos naudojant (32) formulę ir rezultatų šaltinyje pateiktas konstantas: a) išilgai <111> ašies konstantos $C = 132 \pm 9 \text{ MeV}^2/\text{cm}$ ir $\ln(b)=2,36 \pm 0,3$; b) išilgai <110> ašies $C = 108 \pm 12 \text{ MeV}^2/\text{cm}$ ir $\ln(b)=2,26 \pm 0,16$.

Skaitiškai modeliuojant praėjusių kanaliuojančių dalelių energiją, modelyje būtina naudoti tam tikrą medžiagos sluoksnį. Eksperimentinis

rezultatų šaltinis kristalų storių nepateikia, todėl skaitiniame modeliavime naudoti pagal rezultatus įvertinti storiai. Atsižvelgiant į eksperimentiškai nustatytas krintančiųjų ir praėjusių dalelių energijas ir efektyviausias stabdomąsias gebas, teoriniai kristalų storiai buvo įvertinti naudojant formulę (33). Dėl riboto eksperimentinių duomenų tikslumo, teoriškai įvertinti kristalų storiai skiriasi per ~5 % tarp įvairių atvejų. Paprastumo dėlei naudota vidutinė kristalo storio vertė. Apskaičiuotas teorinis vidutinis kristalų storis buvo $143 \pm 0,3 \mu\text{m}$ išilgai $\langle 110 \rangle$ ir $113 \pm 1 \mu\text{m}$ išilgai $\langle 111 \rangle$ kristalinių ašių.

Kiekvieno skaitinio modeliavimo metu buvo naudojama 5 000 – 10 000 dalelių, kad energijos paklaida būtų mažesnė nei 10 keV. Energijos nuostoliai amorfiniuose bandiniuose buvo papildomai įvertinti ir SRIM–2013 programiniu paketu. Energijos nuostolių ir efektyviųjų stabdomųjų gebų vertės protonams ir deutronams germanio kristale dalelėms kanaliuojant išilgai $\langle 110 \rangle$ ir $\langle 111 \rangle$ kristalinių ašių pateiktos lentelėse 2 ir 3. Skaitinio modeliavimo metu gauti energijos nuostoliai ir efektyviosios stabdomosios gebos protonų ir deutronų atveju gerai atitinka eksperimentinius rezultatus (skirtumas mažesnis nei 10 %), kai krintančiųjų dalelių energija didesnė nei 6 MeV. Žemesnėse energijose skirtumas padidėja iki 10 – 20 %. Skirtumo padidėjimas gali būti susijęs su eksperimentinių rezultatų paklaidomis, pluoštelio kampinės skėsties įtaka, teorinių stabdomųjų gebų nuokrypiu nuo eksperimentinių verčių ir kt. Stabdomųjų gebų skirtumų įtaka puikiai stebima 5,54 MeV protonų atveju, kai amorfinę medžiagą praėjusių dalelių energija skiriasi 14 % lyginant GEANT4 ir SRIM–2013 rezultatus.

Vertinant energijos nuostolius amorfinėje medžiagoje, germanio ir galio arsenido atvejais protonų stabdomoji geba yra mažesnė GEANT4 modelyje, o SRIM–2013 stabdomosios gebos yra per 2 – 3 % didesnės 1 – 10 MeV energijų intervale (žr. 26 pav.). Deutronams germanyje stabdomoji geba turi tą pačią tendenciją: 2 – 10 MeV energijų intervale stabdomosios gebos skiriasi per 2 – 3 %, o mažėjant dalelių energijai skirtumas taip pat mažėja. Priešinga situacija stebima galio arsenido medžiagoje – čia GEANT4 modelyje deutronų stabdomosios gebos 1 – 5 MeV energijų intervale yra per 2 % didesnės nei SRIM–2013 stabdomosios gebos. Virš 5 MeV energijos stabdomųjų gebų skirtumas sumažėja iki mažiau nei 1 %. Tokie stabdomųjų gebų skirtumai lemia galutinės dalelių energijos 4 % vidutinį skirtumą, o didžiausias skirtumas siekia ~15 %.

2 lentelė. Energijos nuostolių ir efektyviųjų stabdomųjų gebų vertės germanyje išilgai <110> ašies.

Jonas	Pradinė energija, MeV	Praėjusių dalelių energija, MeV					Efektyvioji stabdomoji geba B, MeV ² /cm			
		Kanaliavimas		Amorfinė medžiaga			Aproks. ⁴	Eksp.	Mod.	Skirtumas, %
		Eksp. ¹	Mod. ²	Eksp.	Mod.	SRIM ³				
H+	7,59	6,62	6,65	4,82	4,87	4,81	456	483	469	3
	7,07	6,07	6,05	4,14	4,15	4,07	447	461	469	2
	6,57	5,56	5,48	3,35	3,4	3,31	439	429	460	7
	6,1	5,02	4,92	2,6	2,62	2,53	429	420	456	8
	5,54	4,4	4,22	1,74	1,51	1,4	417	396	451	13
	5,05	3,8	3,53	–	–	–	405	387	457	17
	4,54	3,1	2,91	–	–	–	389	385	426	10
	4,03	2,32	2,41	–	–	–	369	380	366	4
D+	7,35	5,75	5,77	2,42	2,22	2,05	–	747	726	3

čia ir toliau:

¹ Eksperimentinė vertė,

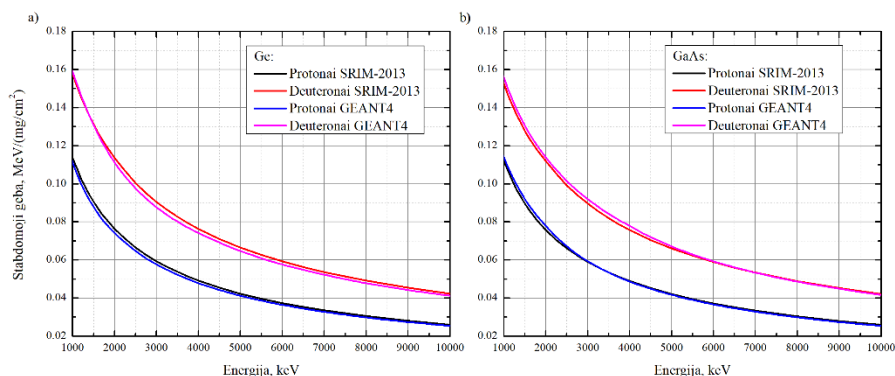
² Skaitiškai modeliuota GEANT4 paketu gauta vertė,

³ SRIM-2013 paketu apskaičiuota vertė,

⁴ Eksperimentinių duomenų aproksimacija.

3 lentelė. Energijos nuostolių ir efektyviųjų stabdomųjų gebų vertės germanyje išilgai <111> ašies.

Jonas	Pradinė energija, MeV	Praėjusių dalelių energija, MeV					Efektyvioji stabdomoji geba B, MeV ² /cm			
		Kanaliavimas		Amorfinė medžiaga			Aproks.	Eksp.	Mod.	Skirtumas, %
		Eksp.	Mod.	Eksp.	Mod.	SRIM				
H+	6,57	5,59	5,51	4,21	4,20	4,14	550	544	567	4
	6,1	5	4,96	3,5	3,54	3,47	538	537	558	4
	5,05	3,74	3,67	1,81	1,83	1,74	507	506	532	5
	4,5	3,03	2,87	–	–	–	487	476	532	11
D+	6,78	5,03	5,18	2,58	2,73	2,60	–	909	847	7



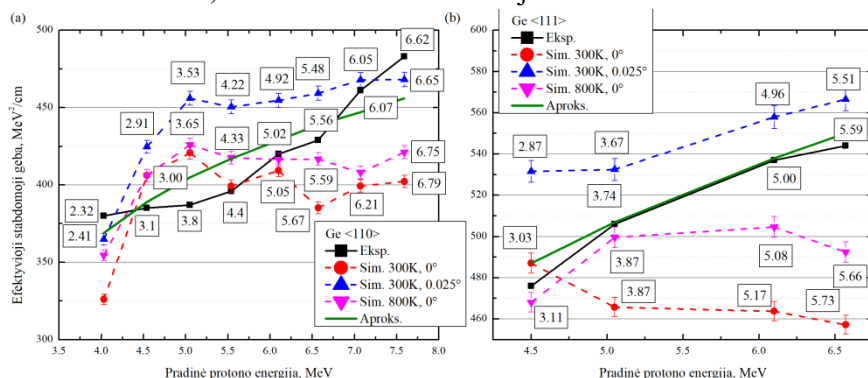
26 pav. Skaitinio modeliavimo būdu gautos stabdomosios gebos germanyje (a) ir galio arsenide (b) naudojant SRIM-2013 ir GEANT4 programinius paketus.

Vertinant dalelių kanaliavimą germanyje išilgai $\langle 110 \rangle$ ašies gaunamas vidutinis 7 % skirtumas tarp efektyviųjų stabdomųjų gebų, o išilgai $\langle 111 \rangle$ ašies šis skirtumas siekia 6 %. Vidutinis eksperimentinių duomenų aproksimacijos skirtumas nuo eksperimentinių duomenų siekia 3 %. Esant didesnėms protonų energijoms, išilgai $\langle 110 \rangle$ germanio ašies, aproksimacijos būdu gauta efektyvioji stabdomoji geba yra mažesnė nei eksperimentinė vertė. Išilgai $\langle 111 \rangle$ ašies sklindančių protonų germanyje (žr. 27 pav. b) ir deuteronų galio arsenide (žr. 28 pav. b) atvejais efektyviųjų stabdomųjų gebų priklausomybė nuo dalelių energijos yra panaši į tiesinę. Vertinant $\langle 110 \rangle$ ašies germanyje atvejį, stebimas nuokrypis nuo tiesinės priklausomybės. Tai rodo didesnę eksperimentinių duomenų išsibarstymą.

Visų 3 skaitinio modeliavimo metu naudotų konfigūracijų palyginimas pateikiamas 27 pav.. Galutinės dalelių energijos ir stabdomosios gebos 800 K ir 300 K temperatūrų atvejais skiriasi nedaug, o 300 K temperatūros ir $0,025^\circ$ pluoštelio skėsties kreivės skirtumas didesnis. Lyginant su eksperimentine kreive, GEANT4 modeliu kanaliuojant išilgai $\langle 110 \rangle$ germanio kristalo ašies gaunama mažiau ryški stabdomosios gebos mažėjimo priklausomybė didėjant dalelių energijai (žr. 27 pav. a). Lyginant galutines dalelių energijas gaunama, kad vidutinis skirtumas tarp eksperimentinių ir skaitinio modeliavimo būdu gautų efektyviųjų stabdomųjų gebų siekia apie 5 %, kai modeliuojamas 300 K temperatūros bandinys su $0,025^\circ$ pluoštelio kampine skėstimi. Tačiau efektyviųjų stabdomųjų gebų didžiausias skirtumas siekia 17 %. Tai rodo, kad tiksliam efektyviųjų stabdomųjų gebų įvertinimui būtina kuo tiksliau žinoti kristalo storį. Taip pat net mažiausias fizikinių parametų (tokių kaip kristalinės

gardelės parametrai, galutinė dalelių energija, pluoštelio kampinė skėstis ir kt.) pokytis gali žymiai keisti stabdomųjų gebų vertę.

Vertinant efektyviąją stabdomąją gebą, kai protonai kanaliuoja išilgai <111> ašies germanio kristale, gaunama ryškesnė priklausomybė nuo dalelių energijos, ypač 300 K temperatūros su pluoštelio skėstimi atveju (žr. 27 pav. b). Skaitiškai modeliuojant pluoštelį be kampinės skėsties gaunamos mažiau ryškios priklausomybės. Didėjant dalelių energijai gaunamas net efektyviųjų stabdomųjų gebų mažėjimas. Labiausiai tikėtina priežastis yra kanaliavimo modelio trūkumai, kurie šiuo metu nustatinėjami.



27 pav. GEANT4 modelių įvertintos efektyviosios stabdomosios gebos ir jų paklaidos skirtingų energijų protonams, kanaliuojantiems išilgai <110> (a) ir <111> (b) germanio ašių. Laukeliuose pateikiama praėjusių dalelių vidutinė energija (MeV). Eksperimentiniai duomenys adaptuoti pagal [101] šaltinį.

3.4.6. Efektyviųjų stabdomųjų gebų vertinimas galio arsenido kristale

Vertinant protonų ir deuteronų efektyviasias stabdomąsias gebas galio arsenido kristale, naudotas tas pats eksperimentinių duomenų šaltinis, kaip ir ankstesniame skyriuje. Šiuo atveju dalelės kanaliavo išilgai <110> ir <111> ašių. Eksperimentinės ir skaitinio modeliavimo sąlygos bei parametrai buvo išlaikyti tokie patys. Efektyviųjų stabdomųjų gebų aproksimacijai naudotos šios konstantos: a) išilgai <111> ašies $C=136 \pm 7 \text{ MeV}^2/\text{cm}$ ir $\ln(b)=2,46 \pm 0,1$; b) išilgai <110> ašies $C=112 \pm 9 \text{ MeV}^2/\text{cm}$ ir $\ln(b)=2,24 \pm 0,1$. Vertinant dalelių efektyviasias stabdomąsias gebas gauta, kad skirtumas nuo eksperimentinių rezultatų beveik visais atvejais yra mažesnis nei 10 % (žr. lenteles 4 ir 5). Didesni nuokrypiai nuo eksperimentinių rezultatų gaunami mažos energijos (4,81 MeV ir 4,34 MeV) deuteronomams, kanaliuojantiems išilgai <110> ašies. Remiantis energijos nuostolių skaitiniais modeliavimais amorfinėms medžiagoms (žr. 26 pav. b), GEANT4 stabdomosios gebos yra per 2 – 5 % mažesnės nei SRIM–2013 stabdomosios gebos tirtame energijų intervale. Todėl stabdomųjų gebų

skirtumas yra viena iš pagrindinių priežasčių efektyviųjų stabdomųjų gebų skirtumo mažos energijos deutronams. Kita priežastis gali būti neįskaityta kai kurių fizikinių procesų įtaka teoriniame GEANT4 kanaliavimo modelyje. Nepaisant šių trūkumų, gaunami vidutiniai 6,2 % ir 4,3 % skirtumai tarp eksperimentinių ir skaitinio modeliavimo metu gautų efektyviųjų stabdomųjų gebų dalelėms sklindant išilgai, atitinkamai, $\langle 110 \rangle$ ir $\langle 111 \rangle$ ašių. Tai rodo puikų GEANT4 kanaliavimo modelio atitikimą galio arsenido kristalo atveju. Teoriškai įvertintų kristalų storiai yra $107 \pm 0,3 \mu\text{m}$ išilgai $\langle 110 \rangle$ ašies ir $100 \pm 0,1 \mu\text{m}$ išilgai $\langle 111 \rangle$ ašies. Lyginant su germanio kristalo atveju, gaunamas mažesnis apskaičiuotų kristalo storio verčių išsibarstymas.

Vertinant protonų, kanaliuojančių išilgai $\langle 111 \rangle$ ašies, energijos nuostolius, gautas puikus atitikimas su eksperimentiniais rezultatais – vidutinis skirtumas yra tik 1 %. Didžiausias energijos skirtumas yra 3 %, kai krintančiųjų dalelių energija siekia 4,48 MeV. Lyginant efektyviasias stabdomąsias gebas, skirtumas tarp teorinių ir eksperimentinių verčių yra 2,6 %. Deuteronų atveju skirtumai šiek tiek didesni – vidutinis energijos nuostolių skirtumas yra 3,5 %, o didžiausias 7,7 % skirtumas gaunamas 4,97 MeV energijos dalelėms. Vidutinis deuteronų efektyviųjų stabdomųjų gebų skirtumas tirtame energijų diapazone yra 6,7 %. Pagal protonų ir deuteronų gautų efektyviųjų stabdomųjų gebų vertes galima teigti, kad GEANT4 modelis gerai skaitiškai modeliuoja kanaliuojančių dalelių energijos nuostolius. Didėjančių skirtumų priežastys mažėjant dalelių energijai yra nustatinėjamos.

Visų 3 skaitinio modeliavimo metu naudotų konfigūracijų palyginimas deuteronų atveju pateikiamas 28 pav.. Eksperimentines galutinės energijos ir efektyviųjų stabdomųjų gebų vertes geriausiai atitinka skaitinio modeliavimo atvejis, kai naudojama 300 K bandinio temperatūra ir $0,025^\circ$ pluoštelio kampinė skėstis. Kai simuliacijose nenaudojama pluoštelio kampinė skėstis, energijos nuostoliai yra žymiai mažesni nei eksperimentiniai. Tai gali reikšti, kad: a) eksperimento metu naudota kristalinė gardelė turi nemažai defektų; b) GEANT4 kanaliavimo modelis nevysiškai teisingai apskaičiuoja energijos nuostolius.

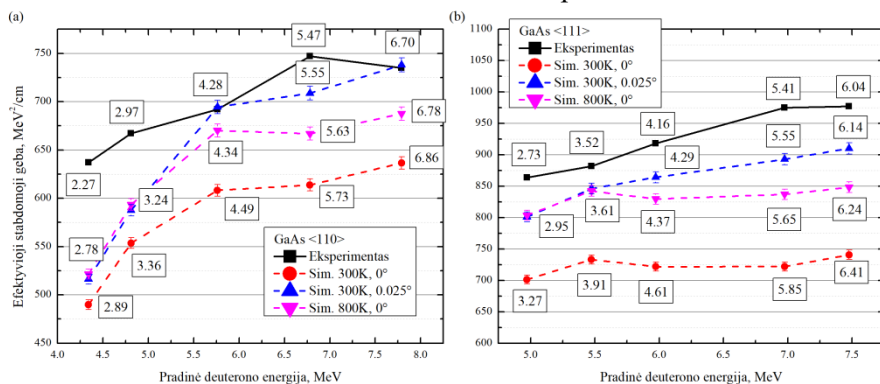
4 lentelė. Energijos nuostolių ir efektyviųjų stabdomųjų gebų vertės galio arsenide išilgai <110> ašies.

Jonas	Pradinė energija, MeV	Praėjusių dalelių energija, MeV					Efektyvioji stabdomoji geba B, MeV ² /cm			
		Kanaliavimas		Amorfinė medžiaga			Aproks.	Eksp.	Sim.	Skirtumas, %
		Eksp.	Sim.	Eksp.	Sim.	SRIM				
H+	7,82	7,09	7,16	5,85	5,92	5,89	476	506	462	9
	7,33	6,59	6,63	5,30	5,31	5,29	468	486	457	6
	6,82	6,06	6,07	4,68	4,66	4,64	459	450	452	0,4
	6,31	5,53	5,51	3,99	3,97	3,96	450	435	442	2
	5,79	4,98	4,92	3,29	3,22	3,22	439	420	435	4
	5,30	4,38	4,34	2,52	2,44	2,46	427	415	432	4
	4,80	3,77	3,71	1,58	1,48	1,56	414	411	433	5
	4,28	3,15	3,00	–	–	–	398	391	435	11
	3,79	2,48	2,40	–	–	–	379	382	402	5
	3,28	1,77	1,92	–	–	–	355	355	330	7
D+	7,79	6,70	6,70	4,36	4,44	4,50	–	735	738	0,4
	6,78	5,47	5,55	2,80	2,84	2,97	–	747	709	5
	5,76	4,28	4,28	–	–	–	–	692	694	0,3
	4,81	2,97	3,25	–	–	–	–	667	588	13
	4,34	2,27	2,79	–	–	–	–	637	516	21

5 lentelė. Energijos nuostolių ir efektyviųjų stabdomųjų gebų vertės galio arsenide išilgai <111> ašies.

Jonas	Pradinė energija, MeV	Praėjusių dalelių energija, MeV					Efektyvioji stabdomoji geba B, MeV ² /cm			
		Kanaliavimas		Amorfinė medžiaga			Aproks.	Eksp.	Sim.	Skirtumas, %
		Eksp.	Sim.	Eksp.	Sim.	SRIM				
H+	7,48	6,60	6,64	5,65	5,64	5,62	600	622	591	5
	6,98	6,09	6,10	5,04	5,02	5,00	590	583	573	2
	6,48	5,53	5,53	4,42	4,37	4,35	578	572	567	1
	5,47	4,36	4,35	2,97	2,96	2,96	551	549	552	1
	4,97	3,76	3,72	2,19	2,13	2,17	535	532	544	2
	4,48	3,11	3,02	1,27	1,11	1,22	516	518	546	5
	3,97	2,43	2,47	–	–	–	493	494	482	2
D+	7,48	6,04	6,14	4,31	4,26	4,32	–	977	910	7
	6,98	5,41	5,55	3,62	3,50	3,59	–	975	893	9
	5,97	4,16	4,29	1,84	1,72	1,92	–	918	864	6
	5,47	3,52	3,61	–	–	–	–	882	846	4
	4,97	2,73	2,95	–	–	–	–	864	801	8

Lyginant 300 K ir 800 K temperatūrose kreives stebima aukštesnės temperatūrose įtaka energijos nuostoliams, o tuo pačiu ir kanaliavimo efektyvumui – esant žemesnei bandinio temperatūrai, galutinė dalelių energija yra didesnė, nei esant aukštesnei temperatūrai. Vertinant deuteronų žemos energijos srityje egzistuoja stiprus stabdomosios gebos sumažėjimas kai dalelės kanaliuoja išilgai $\langle 110 \rangle$ ašies, lyginant simuliuotą ir eksperimentinę kreives. Tas pats stebima ir protonų, kanaliuojančių germanio kristale, atveju (žr. 27 pav. a). Skaitiškai modeliuojant tokių energijų krintančiąsias daleles pastebimas mažesnis praėjusių dalelių skaičius – kanaliavimo efektyvumas krenta dėl atsirandančios sklaidos dideliais kampais.



28 pav. Efektyviosios stabdomosios gebos ir jų paklaidos skirtingų energijų deuteronams, kanaliuojantiems išilgai $\langle 110 \rangle$ (a) ir $\langle 111 \rangle$ (b) galio arsenido kristalo ašių. Laukeliuose pateikiama praėjusių dalelių vidutinė energija (MeV). Eksperimentiniai duomenys adaptuoti pagal [101] šaltinį.

3.5. Dalelių kanaliavimo modelio rezultatų apibendrinimas

Darbo metu vertinant originalaus GEANT4 11.0 kanaliavimo modelio patikimumą nustatyta, kad modelis neteisingai vertina kanaliuojančių dalelių energijos nuostolius. Taip pat modelis neatsižvelgia į kritinio kanaliavimo kampo sąlygą. Modelis buvo modifikuotas įvedant kritinio kampo sąlygą pagal (13) formulę verčiant daleles nustoti kanaliuoti, kai kritinis kampas yra viršijamas. Modeliu gauti rezultatai parodė, kad kanaliavimo tikimybė ryškiai sumažėja, kai dalelių kritimo kampai yra artimi teoriniams kritiniams kampams. Nustatyta, kad kanaliavimo efektyvumo įvertinimui modeliavimo metu įtakos turi nustatyta maksimali dalelės žingsnio dydžio vertė. Lyginant 4 nm ir 20 nm žingsnio apribojimus 2 MeV energijos protonams silicijoje, gauta, kad 4 nm žingsnio atveju stebimas stiprus kanaliavimo efektyvumo mažėjimas, kai kampas tarp krintančiųjų dalelių ir pagrindinės kanaliavimo

ašies yra didesnis nei $0,1^\circ$. Toks mažėjimas 20 nm atveju yra žymiai silpnesnis. Esant mažesniam žingsnio dydžiui, dalelės sklaidimas tarp atomų grandinių yra modeliuojamas detaliau, todėl didėja branduolių ir elektronų pasiskirstymų įtaka dalelėms, esančioms arti atomų ašių. Lyginant 20 nm žingsnio apribojimo atvejį su FLUX7 rezultatais gaunamas geras atitikimas, rodantis, kad modifikuotas GEANT4 modelis gerai skaitiškai modeliuoja dalelių kanaliavimą. Darbo metu įvertinta protonų, kanaliuojančių išilgai $\langle 100 \rangle$ ašies silicyje, energinė priklausomybė nuo temperatūros 100K – 1000 K intervale. Lyginant 100 K ir 300 K spektrus gauta, kad kanaliuojančių dalelių išeiga yra labai panaši, tačiau lyginant 100 K ir 1000 K atvejus gauta, kad išeiga sumažėja nuo 22 % iki 12 %.

Antrasis modelio pakitimas buvo fizikinių procesų pakeitimas iš skerspjuvių modifikavimo į sąveikos atstumo modifikavimą (wrapper klasių gražinimas). Tai lėmė pagerėjusius energijos nuostolius kanaliuojančioms dalelėms. Šio darbo metu buvo vertintos kanaliuojančių protonų ir deuteronų stabdomosios gebos, kai dalelės juda išilgai pagrindinėms ašims ($\langle 100 \rangle$, $\langle 110 \rangle$ ir $\langle 111 \rangle$) silicio, germanio ir galio arsenido kristaluose 1 – 20 MeV energijų diapazone. Dažniausiai skirtumas tarp skaitinio modeliavimo ir eksperimentinių rezultatų siekė iki 10 %, o didžiausias skirtumas siekė ~20 %. Skirtumas didėja mažėjant pirminei dalelių energijai, kai atsiranda pastebimi skirtumai tarp GEANT4 ir SRIM stabdomųjų gebų. Pagrindinės didelių skirtumų priežastys yra eksperimentinių sąlygų kompleksiskumas (kristalų kokybė, jonų pluoštelių parametrai, detektoriai, eksperimentinė geometrija ir kt.) ir modelio trūkumai (stabdomosios gebos skirtumai, žingsnio dydžio apribojimai, fizikinių procesų skerspjuviai ir kt.). Apibendrinant, modifikuotas GEANT4 kanaliavimo modelis yra tinkamas kanaliuojančių protonų ir deuteronų energijos nuostoliams vertinti silicio, germanio ir galio arsenido kristaluose.

4. Kanaliuojančių dalelių atgalinės sklaidos modelis

Šioje dalyje apibūdinami pagrindiniai atgalinės sklaidos spektrų nuo amorfinių medžiagų modelio pakitimai pritaikant modelį kanaliuojančioms dalelėms, nurodomos tyrime naudotos medžiagos, kristalinių potencialų pasiskirstymai bei atgalinės sklaidos skerspjūviai. Rezultatų skiltyje pateikiama teorinio atgalinės sklaidos spektro priklausomybės nuo kampinės pluoštelio skėsties bei bandinio temperatūros. Pateikiami teorinių ir eksperimentinių atgalinės sklaidos spektrų, gautų atsitiktinio kampo ir kanaliavimo atvejais, palyginimai gryno silicio, silicio dioksido, silicio karbido ir deimanto kristalams.

4.1. Amorfinių medžiagų GEANT4 RBS modelio modifikacija atsižvelgiant į jonų kanaliavimą

Kanaliuojančių dalelių atgalinės sklaidos spektrų skaitinio modeliavimo modelis buvo gautas sujungiant modifikuotą dalelių kanaliavimo modelį kartu su amorfinių medžiagų atgalinės sklaidos modeliu. Dalelių kanaliavimo skaitinis modelis šiuo atveju nesikeitė ir pagrindinė modifikacija buvo atliktos atgalinės sklaidos modeliui. Kadangi atgalinė sklaida vyksta dideliu kampu, *Lindhard* potencialo aproksimacija, reikalaujanti sklaidos įvykių koreliacijos ir sklaidos mažais kampais, tampa negaliojanti, todėl atgal išsklaidytos dalelės kanaliavimo procesas skaitiškai nemodeliuojamas. Kubinių gardelių pagrindinės kristalografines ašys ($\langle 100 \rangle$, $\langle 110 \rangle$ ir $\langle 111 \rangle$) skiriasi tarpusavyje 45° intervalais, todėl kanaliavimo procesą galima atmesti atgalinės sklaidos $135^\circ < \varphi < 180^\circ$ kampų atvejais. Dėl šių priežasčių atgal išsklaidytos dalelės galutinė energija, energijos sklaida ir kiti parametrai skaičiuojami taip, tarsi dalelė sąveikautų su amorfine medžiaga. Atgalinės sklaidos skerspjūvis, kaip ir amorfinių medžiagų modelyje, skaičiuojamas kiekviename dalelės žingsnyje, o skaičiuojant atgalinės sklaidos intensyvumą buvo atlikta modifikacija panaudojant modifikuojantį daugiklį, kuris yra santykinė branduolių koncentracija dalelės pozicijoje (narys n (4) išraiškoje). Santykinės tam tikros rūšies branduolių koncentracijos pasiskirstymai buvo gauti skaitiškai modeliuojant gardelę ECHARM kodu. Kaip ir anksčiau, naudotas 2D koncentracijos pasiskirstymas. Kadangi santykinės branduolių koncentracijos yra lokalizuotos prie atomų ašių, kanaliuojančių dalelių atgalinės sklaidos signalas stipriai keičiasi nuo dalelių priartėjimo prie atomų ašių.

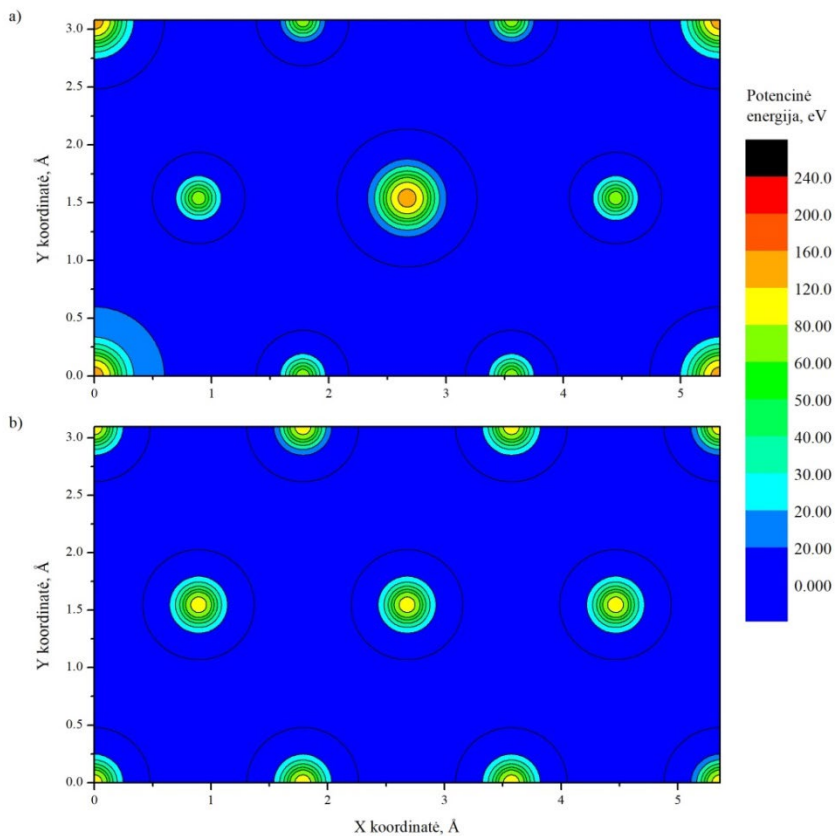
Detalus kanaliuojančių dalelių judėjimo skaitinis modeliavimas reikalauja daug kompiuterinių resursų ir laiko, nes sprendžiamos anksčiau minėtos diferencialinės judėjimo lygtys (žr. formulę (31)). Vienas pagrindinių amorfinių medžiagų spektrų modeliavimo trukmę ilginančių procesų buvo daugkartinės sklaidos sukelta energijos nuostolių sklaida. Kadangi daugkartinės sklaidos sukelta energijos nuostolių sklaida žymią įtaką daro tik sunkesnėms nei protonai dalelėms ir tik žemos energijos srityje, o kanaliuojančių dalelių atgalinės sklaidos spektrai žemos energijos srityse išplinta (žr. skyrių 4.4.1), kanaliuojančių dalelių atgalinės sklaidos spektrų skaitiniame modelyje atsisakyta šio parametro vertinimo.

4.2. Tyrime naudotos medžiagos

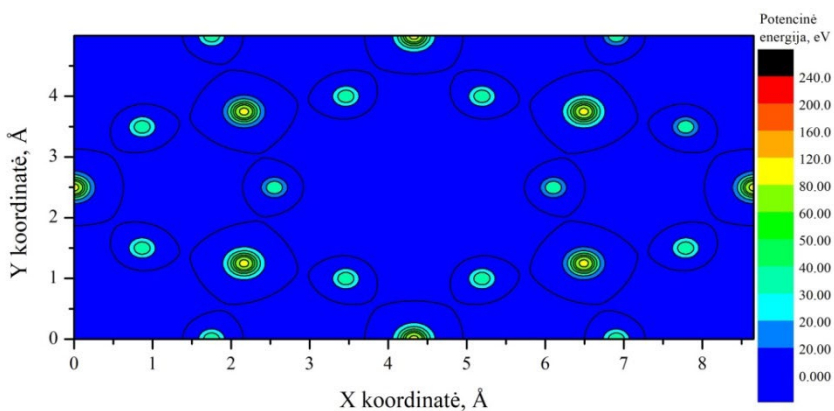
Kanaliuojančių dalelių atgalinės sklaidos modeliui validuoti buvo skaitiškai modeliuojami 1 – 3 MeV energijos krintančiųjų protonų spektrai nuo deimanto, silicio karbido, silicio dioksido ir gryno silicio kristalų. Gryno silicio bandinių atveju kanaliavimas skaitiškai modeliuotas išilgai $\langle 100 \rangle$, $\langle 110 \rangle$ ir $\langle 111 \rangle$ kristalinių ašių, deimanto atveju išilgai $\langle 100 \rangle$ ašies. Silicio dioksido ir silicio karbido atveju kanaliavimas modeliuotas išilgai $\langle 0001 \rangle$ ašies, dar žinomos kaip optinė, arba c–ašis. Pastarosios gardelės yra heksagoninės, tačiau kristalinių charakteristikų vertinimui ECHARM programos aplinkoje buvo sukurtos kubinės gardelės iš analogiškų atomų padėčių. Tyrimo metu gardelių parametrai vertinti 300 K temperatūroje, o skaitinio modeliavimo metu naudoti medžiagų tankiai: 3,5 g/cm³ – deimanto, 3,16 g/cm³ – SiC, 2,32 g/cm³ – SiO₂, 2,33 g/cm³ – gryno silicio. Gardelių charakteristikų skaitiniame modeliavime naudotos tokios *Debye* temperatūros: a) 640 K silicio kristalinei gardelei [94], b) 1880 K deimanto gardelei [102], c) 1120 K silicio karbido gardelei 4H ir 6H politipams [103], d) 560 K silicio dioksido gardelei [104], [105]. Vidutinės virpesių amplitudės, apskaičiuotos ECHARM kodu, šiais atvejais yra: a) 0,0652 Å gryno silicio gardelei, b) 0,0433 Å anglies atomams deimanto gardelėje, c) 0,0408 Å silicio ir 0,0624 Å anglies atomams SiC gardelėje, d) 0,0736 Å silicio ir 0,0975 Å deguonies atomams SiO₂ gardelėje. Gryno silicio kristalo atveju gardelės charakteristikos buvo anksčiau įvertintos 300 K – 1200 K temperatūroje, kur virpesių amplitudė kinta nuo 0,0652 Å iki 0,124 Å, atitinkamai. Kristalinės charakteristikos įvertintos naudojant *Moliere* formos faktorius, nes jie dažniausiai naudojami jono – atomo sąveikai apibūdinti dalelių kanaliavimo atvejais [106]. Teorinių spektrų modeliavimo metu

kanaliojančių dalelių žingsnis buvo apribotas iki 0,5 nm, o amorfinių medžiagų atvejais – 1 nm.

Prieš atliekant atgalinės sklaidos spektrų skaitinius modeliavimus, įvertintos gardelių charakteristikos. Silicio karbido atveju buvo vertintos 2 konfigūracijos: SiC-4H ir SiC-6H (žr. 29 pav.). Vertinant SiC-4H potencinės energijos pasiskirstymą pastebima, kad centrinė ir kraštinė atomų grandinė turi daugiau potencinės energijos lyginant su kitomis pozicijomis. SiC-6H atveju (žr. 29 pav. b) skirtumas tarp atomų grandinėlių pozicijų nestebimas. Lyginant maksimalias potencinės energijos vertes, SiC-4H konfigūracijoje potencialas siekia 156 eV kraštinėje pozicijoje ir 70 eV mažesnės energijos pozicijose. SiC-6H konfigūracijoje maksimali potencinės energijos vertė siekia 100 eV. Deimanto kristalo atveju potencinės energijos pasiskirstymas panašus į silicio gardelės, išilgai $\langle 100 \rangle$ ašies (žr. 18 pav. ir 19 pav.), tačiau maksimali potencinės energijos vertė deimanto atveju siekia 73 eV, kai tuo tarpu silicio atveju 88 eV esant tai pačiai temperatūrai. Silicio dioksido kristalinė gardelė išilgai $\langle 0001 \rangle$ ašies yra pakankamai sudėtinga, tačiau egzistuoja vienas pagrindinis kanalas ir keletas siauresnių, kuriuose gali kanaliuoti dalelės (žr. 30 pav.). Tokioje gardelėje maksimali potencinė energija silicio atomo pozicijoje siekia 92 eV, o deguonies atomo pozicijoje 40 eV.

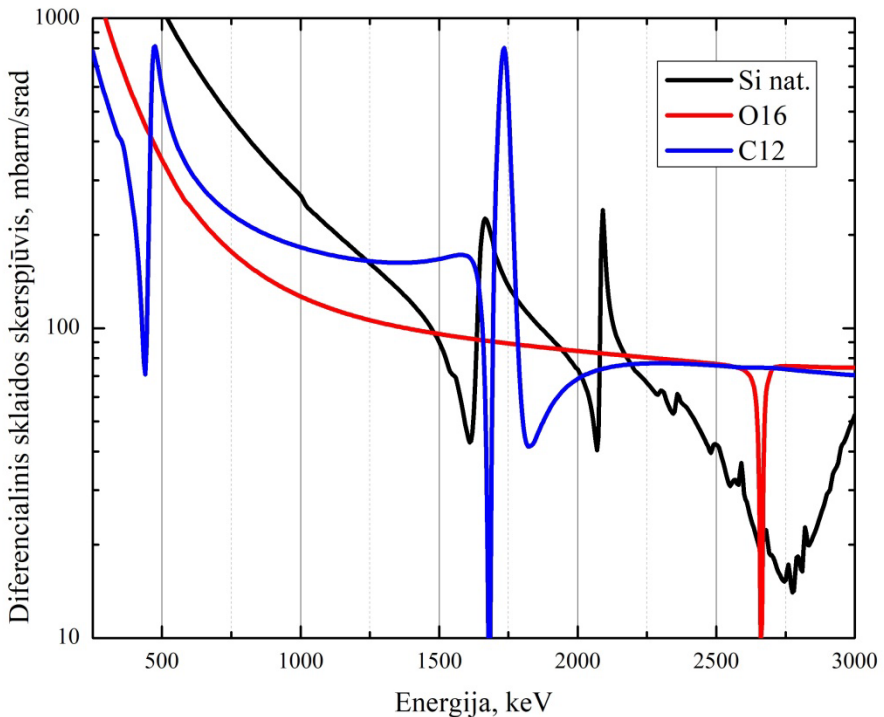


29 pav. Gardelių potencinės energijos pasiskirstymas išilgai $\langle 0001 \rangle$ ašies: a) SiC-4H; b) SiC-6H.



30 pav. Silicio dioksido gardelės potencinės energijos pasiskirstymas išilgai $\langle 0001 \rangle$ ašies.

Palyginime naudotų atomų teoriniai atgalinės sklaidos skerspjūviai turi rezonansinių regionų 0,25 – 3,0 MeV energijų diapazone (žr. 31 pav.) Tirtame energijų intervale sklaidos nuo O^{16} atomo reakcijos skerspjūvis yra pakankamai ištisinis, rezonansinių skerspjūvio padidėjimų nėra, tačiau egzistuoja žymus sumažėjimas ties $\sim 2,66$ MeV energija. Sklaidos nuo C^{12} atomo atveju egzistuoja stiprus skerspjūvio rezonansas ties 1,73 MeV ir silpnėsnis rezonansas ties 0,48 MeV. Vertinant silicio atomų atgalinės sklaidos skerspjūvį stebimi 2 pagrindiniai rezonansai ties 1,66 MeV ir 2,09 MeV bei netolygaus skerspjūvio diapazonas nuo 2,1 MeV iki 3,0 MeV. Teorinio skerspjūvio netolygumas susijęs su SigmaCalc skaičiuoklės ypatumais.



31 pav. Skaitiškai modeliuoti diferencialiniai atgalinės sklaidos skerspjūviai 160° sklaidos atveju nuo O^{16} , C^{12} ir natūralios sudėties silicio atomų.

4.3. Skaitinio modeliavimo ir eksperimentų metodika

Eksperimentiniai kanaliavimo ir atsitiktinės krypties atgalinės sklaidos spektrai buvo skaitmenizuoti remiantis [107]–[112] šaltiniais. Skaitmenizavimui buvo naudojama WebPlotDigitizer 4.6 aplikacija [113].

Kai eksperimentinių duomenų šaltiniuose spektrai persiklojo, buvo atliekamas rankinis spektrų atrinkimas ir išskyrimas. Kai kurie autoriai eksperimentinių spektrų horizontalioje skalėje naudojo ne energijos, o spektro kanalų vienetus. Tais atvejais buvo atliekama energinė spektrų kalibracija, naudojant SIMNRA programinį paketą. Kalibruotų spektrų energinė skalė buvo naudojama palyginimui su GEANT4 rezultatais. Toliau pateikti skaitiškai modeliuoti ir eksperimentiniai spektrai, gauti atsitiktinės krypties sąlygomis (amorfinės medžiagos analogija), rodo įmanomą atitikimo ribą. Jeigu teorinis ir eksperimentinis amorfinės medžiagos spektrai žymiai skiriasi – tikimybė, kad kanaliuojančių dalelių spektrai bus panašesni yra labai maža. Eksperimentiniai ir skaitinio modeliavimo spektrai bendruose grafikuose yra normuoti į pilnutinį kiekvieno spektro integralą, t.y. kanalų verčių sumą.

4.4. Rezultatai

4.4.1. Rezonansinių juostų priklausomybė nuo kanaliavimo sąlygų

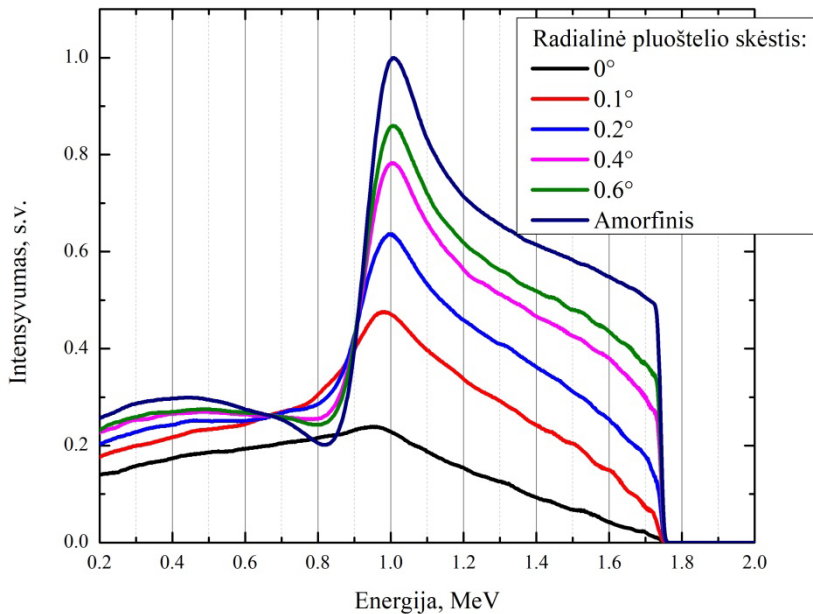
Kristalinių medžiagų atgalinės sklaidos spektrai labai stipriai priklauso nuo dalelių pluoštelio energijos, kampinės skėsties, energijos sklaidos, fokusavimo, sklaidos geometrijos, kristalo kokybės ir kitų parametrų. dalelių Registruojant eksperimentinius atgalinės sklaidos spektrus krintančiųjų pluoštelis fokusuojamas lygiagrečiai kristalografinėms ašims. Tiksliai pluoštelio orientacija kristalografinės ašies atžvilgiu gaunama matuojant kampines priklausomybes (angl. *angular scan*), ieškant mažiausiai intensyvios atgalinės sklaidos. Kadangi dalelių kanaliavimas yra efektyviausias tada, kai pluoštelis sklinda lygiagrečiai atomų grandinėms arba plokštumoms, pluoštelio kolimavimo sistema yra būtinas elementas eksperimentiniams matavimams atlikti. Realiomis sąlygomis visada egzistuoja nenulinė pluoštelio kampinė skėstis. Siekiant įvertinti, kokią įtaką atgalinės sklaidos spektrui daro pluoštelio kampinė skėstis, atliktas teorinis vertinimas 2 MeV energijos protonams, sklindantiems išilgai $\langle 100 \rangle$ ašies gryno silicio kristale (žr. 32 pav.). Palyginimui buvo naudota 0 – 0,6° kampinė skėstis, 300 K temperatūros gardelė, o teorinis kritinis kanaliavimo kampas šiuo atveju siekia 0,43°.

Lyginant dalelių kanaliavimo ir amorfinį atvejus pastebima, kad kintant pluoštelio kampinei skėščiai keičiasi ne tik bendras spektro intensyvumas, tačiau ir jo forma (žr. 32 pav.). Idealiai lygiagrečiam pluošteliumi maksimalus kreivės intensyvumas siekia tik 20 % amorfinės medžiagos spektro

maksimalaus intensyvumo. Spektre stebimas beveik tiesinis intensyvumo didėjimas nuo ~ 1.75 MeV iki $\sim 1,0$ MeV energijos, kur turėtų būti stebima rezonansinė smailė, ir tiesiškas intensyvumo mažėjimas mažėjant išsklaidytų dalelių energijai. Didėjant kampinei pluoštelio skėsciai, atgalinės sklaidos spektruose atsiranda didesnio intensyvumo didelės energijos frontas, taip pat didėja bendras spektro intensyvumas ir ryškėja rezonansinė smailė. Padidinus kampinę skėstį iki $0,1^\circ$, rezonansinė juosta tampa labiau išreikšta – maksimalus intensyvumas siekia 47 %. Padidėjus pluoštelio skėsciai padidėja ir didelės energijos fronto intensyvumas – intensyvėja sklaida nuo paviršinių medžiagos sluoksnių. Toliau didinant pluoštelio skėstį atgalinės sklaidos spektrų intensyvumas ir forma artėja prie amorfinės medžiagos spektro. Vienas iš ryškiausių dalelių kanaliavimo ypatumų atgalinės sklaidos spektruose yra rezonansinės juostos pokyčiai. Vertinant silicio rezonansinę smailę ir siaurą stipriai sumažėjusio reakcijos skerspjuvio priklausomybę nuo energijos ties $\sim 1,61$ MeV (žr. 31 pav.) kanaliuojančių dalelių spektruose, pastebima, kad juo labiau lygiagretus kristalografinė ašiai pluoštelis – tuo silpniau atgalinės sklaidos spektre pasireiškia šis regionas. Didinant pluoštelio skėstį rezonansinės juostos regione kreivės forma artėja prie amorfinės medžiagos spektro.

Atgalinės sklaidos spektro formos ir intensyvumo pokytis kintant dalelių kampinei skėsciai susijęs su dalelių kanaliavimo procesu. Kai dalelės kanaliuoja, elektroniniai energijos nuostoliai kelio vienetui yra žymiai mažesni lyginant su amorfine medžiaga dėl mažesnio lokalaus elektronų tankio (žr. formulę (1)). Dėl šios priežasties kanaliuojančios dalelės turi daugiau energijos tame pačiame medžiagos gylyje, todėl ir rezonansinė dalelių energija pasiekama gilesniuose medžiagos sluoksniuose. Tai rodo, kad rezonansinė juosta atgalinės sklaidos spektruose teoriškai turėtų atsirasti prie žemesnių energijų. Tačiau, kaip rodo skaitinio modeliavimo rezultatai, lygiagretaus pluoštelio atveju rezonansinė kreivė yra pasislinkusi tik per 50 keV lyginant su amorfinės medžiagos spektru. Todėl atgalinės sklaidos spektruose stebimos rezonansinės juostos yra sukeltos dalelių, kurios santykinai greitai nustoja kanaliuoti (angl. *dechannel*) arba nekanaliavo iš viso. Tokios dalelės energiją praranda beveik kaip amorfinėse medžiagose ir rezonansinė juosta stebima panašios energijos sirtyje. Kadangi atgalinės sklaidos intensyvumas kanaliuojančioms dalelėms yra santykinai mažas lyginant su amorfinėmis medžiagomis, jų indėlis į rezonansinę juostą taip pat išlieka nedidelis.

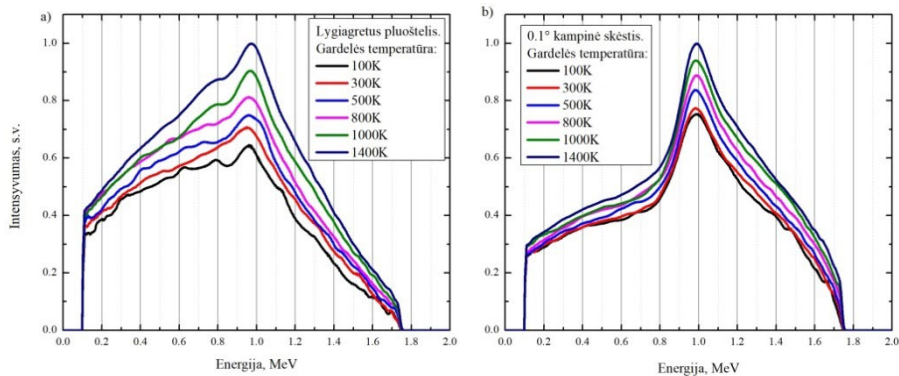
Kanaliuojančių dalelių atgalinės sklaidos spektruose taip pat stebimas rezonansinės juostos formos išplitimas. Dalelių energijos pasiskirstymas išplatėja didėjant įsiskverbimo į medžiagą gyliui dėl atsitiktinių energijos nuostolių proceso – labiau fokusuotos dalelės praranda mažiau energijos, o dalelės, kurios praleidžia daugiau laiko (arba priartėja arčiau) atomų grandinėlių, praranda daugiau energijos. Kanaliuojant dalelei ir sklaidai įvykus gilesniame sluoksnyje, atgal išsklaidyta dalelė turi nukeliauti didesnę atstumą medžiagoje atgal iki detektoriaus. Todėl prisideda dar papildoma energinė sklaida. Dėl padidėjusios energinės sklaidos dalelėms kanaliuojant ir keliaujant didesnę atstumą iki detektoriaus, rezonansinė juosta išplatėja, pasilenka į mažesnės energijos sritį ir sumažėja jos intensyvumas. Todėl esant geresniam kanaliavimo efektyvumui (lygiagretumui kristalografinėms ašims) rezonansinės juostos tampa mažiau išreikštos.



32 pav. 2 MeV protonų atgalinės sklaidos spektrų priklausomybė nuo kampinės pluoštelio skėsties silicyje. Spektrai gauti GEANT4 modeliu ir normuoti į maksimalų amorfinės medžiagos spektro intensyvumą.

Siekiant įvertinti temperatūros įtaką atgalinės sklaidos spektrams, jie buvo skaitiškai modeliuojami naudojant gardelių charakteristikas, gautas prie skirtingų temperatūrų. Didėjant gardelės temperatūrai, didėja ir atomų virpesių amplitudės, todėl atomų pozicijos tampa mažiau apibrėžtos ir atomų

grandinėlės suminis potencialas sumažėja. Taip pat pakinta elektronų ir branduolių pasiskirstymas – vyksta išplitimas nuo atomų grandinėlės pozicijos. Kanaliavimo RBS spektrai buvo įvertinti 2 MeV energijos protonams kanaliuojant išilgai $\langle 100 \rangle$ kristalografinės silicio ašies temperatūrų diapazone 100 K – 1400 K. Palyginimas buvo atliktas 2 atvejais: idealiai lygiagrečiam dalelių pluošteliui ir pluošteliui su $0,1^\circ$ kampine skėstimi (žr. 33 pav.). Abiem atvejais pagrindinis spektrų skirtumas didėjant gardelės temperatūrai yra didesnis bendras intensyvumas ir kiek labiau išreikšta rezonansinė smailė, tačiau pati jos forma išlieka nepakitusi. Kai pluoštelis lygiagretus, rezonansinės juostos intensyvumas 100 K atveju siekia 65 % maksimalaus intensyvumo 1400 K atveju. Kai naudojama pluoštelio kampinė skėstis, maksimalus rezonansinės juostos intensyvumas 100 K atveju lygus 75 % intensyvumo 1400 K temperatūros atveju. Taip pat šiuo pluoštelio skėsties atveju stebimas labai panašus 100 K ir 300 K temperatūros kreivių intensyvumas, kai maksimalus 300 K kreivės intensyvumas siekia 77 %. Lyginant maksimalų intensyvumą 100 K ir 1400 K atvejais temperatūros padidėjimas nedaro spektrams tokios žymios įtakos kaip kampinės pluoštelio skėsties didėjimas.



33 pav. Atgalinės sklaidos spektrų priklausomybė nuo gardelės temperatūros: a) lygiagretus pluoštelis, b) $0,1^\circ$ pluoštelio kampinė skėstis. Spektrai normuoti į maksimalų 1400 K kreivės intensyvumą.

4.4.2. Atgalinė sklaida kanaliuojant išilgai $\langle 100 \rangle$ ašies silicyje

Teoriniai protonų atgalinės sklaidos spektrai nuo silicio kristalo išilgai $\langle 100 \rangle$ kristalografinės ašies buvo įvertinti 1,9 MeV – 2,5 MeV energijų ruože. Eksperimentiniai duomenys buvo adaptuoti pagal [107] šaltinį. Eksperimentinę sistemą sudarė $\theta_{\text{LAB}} = 160^\circ$ kampu pastatytas gryno silicio barjerinis detektorius su 16 keV engine skyra, ^{28}Si bandinys ir gerai

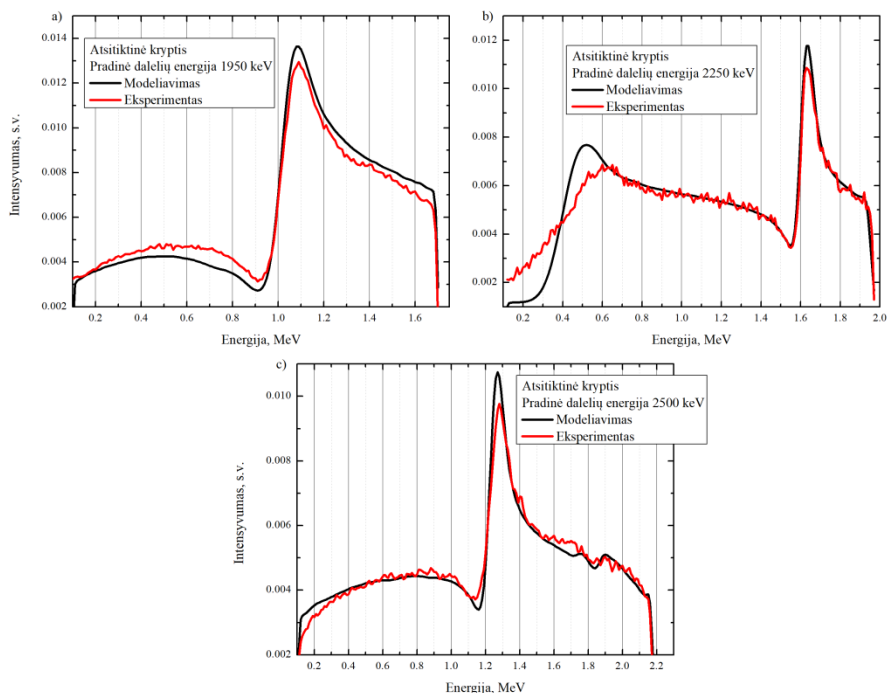
kolimuotas pluoštelis. Šaltinio autoriai neskelbia eksperimentinės kampinės pluoštelio skėsties. Atliekant atsitiktinės krypties spektrų matavimus bandinys buvo sukamas 5°/s intervalu aplink pluoštelio ašį.

Eksperimentinių ir teorinių spektrų atitikimas atsitiktinės orientacijos kryptimis yra geras: skaitiškai modeliuotų spektrų formos atitinka eksperimentines ir daugelyje energinių sričių intensyvumai taip pat gerai sutampa (žr. 34 pav.). Pagrindiniai skirtumai stebimi ties rezonansinėmis juostomis ir mažų energijų srityje. Šie skirtumai gali būti paaiškinami 3 pagrindiniais faktoriais. Pirmiausia, spektrai gali skirtis dėl teorinių atgalinės sklaidos skerspjūvių neatitikimo, kurie buvo nagrinėti 2.9.1 skyriuje. Taip pat neatsižvelgiama į daugkartinę dalelių sklaidą, kuri spektruose pasireiškia padidėjusiu mažos energijos srities intensyvumu [114]. Trečiasis žymią įtaką darantis veiksnys gali būti bandinio sukimas apie ašį. Sukant bandinį, atstumas tarp sklaidos gylio ir detektoriaus paviršiaus kinta, todėl atsiranda papildoma energinė sklaida. Dėl šių priežasčių suminė energinė sklaida gali didėti, tačiau skaitiniame modelyje atsižvelgti į šiuos procesus nėra galimybės ir energinė sklaida jų atžvilgiu nevertinama.

1,95 MeV protonų indukuotuose atgalinės sklaidos spektruose egzistuoja žymesnis teorinio ir eksperimentinio spektrų neatitikimas – teorinis spektras yra intensyvesnis 1,0 MeV – 1,7 MeV srityje, tačiau mažiau intensyvus už rezonansinės juostos 0,1 MeV – 1,0 MeV intervale. Toks teorinio spektro intensyvumo pokytis gali būti susijęs su neįskaitytais energijos sklaidos faktoriais arba teorinio skerspjūvio neatitikimais. Panašios energijos amorfinio bandinio atveju žemos energijos sritis sutampa geriau, kai lyginami teoriniai ir eksperimentiniai spektrai (žr. 7 pav. a), todėl šiuo atveju gautas skirtumas tarp teorinio ir eksperimentinių spektrų gali rodyti anksčiau minėtų faktorių įtaką spektrams.

Vertinant 2,25 MeV ir 2,5 MeV protonų indukuotus atgalinės sklaidos spektrus stebimas geresnis skaitiškai modeliuotų kreivių atitikimas eksperimentinėms (žr. 34 pav. b ir c). 2,25 MeV atveju teorinis spektras gerai atitinka eksperimentinį spektrą beveik visame energijos diapazone – stebima kiek intensyvesnė ir smalesnė rezonansinė kreivė ties ~1,65 MeV, o žemos energijos srityje (< 0,6 MeV) stebimas kreivių neatitikimas. Pastaruoju atveju eksperimentiniame spektre rezonansinė kreivė, atitinkanti rezonansinį skerspjūvį ties 1,67 MeV (žr. 31 pav.), yra išplitusi į mažų energijų sritį ir neatitinka skerspjūvio formos pokyčio, o teorinė kreivė atitinka skerspjūvio pokytį. Šis neatitikimas susijęs su anksčiau minėtais faktoriais. 2,5 MeV protonų atveju skaitiškai modeliuoto spektro forma gerai

atitinka eksperimentinį – ryškesni skirtumai stebimi tik rezonansinės juostos srityje (1,1 MeV – 1,3 MeV) ir žemos energijos srityje (< 0,4 MeV). Skaitiškai modeliuotame spektre rezonansinė juosta (~1,28 MeV) yra intensyvesnė, taip pat stebimas stipresnis atgalinės sklaidos skerspjūvio sumažėjimo efektas (~1,19 MeV).

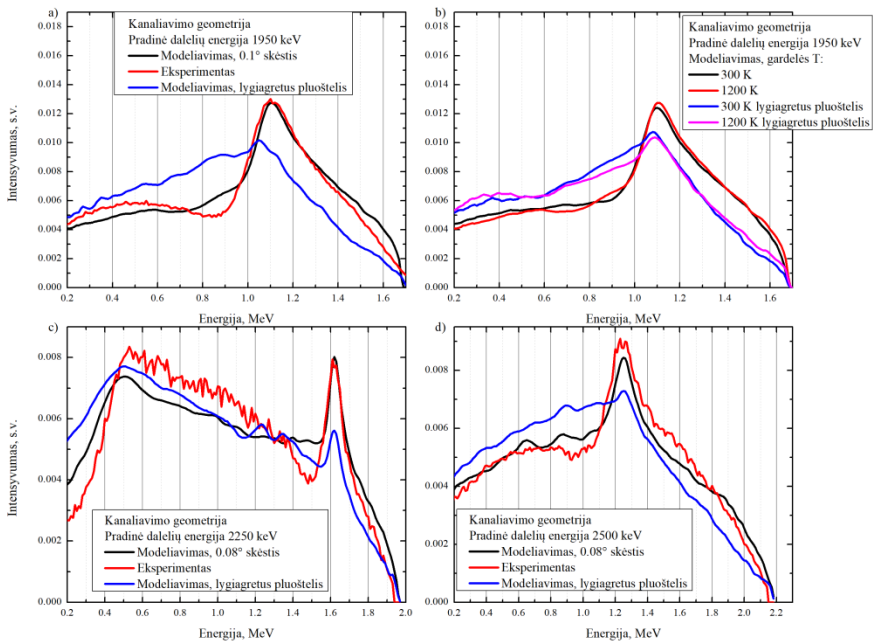


34 pav. Eksperimentiniai ir skaitiškai modeliuoti atgalinės sklaidos spektrai nuo silicio, gauti atsitiktinio kampo atveju. Krintančiųjų protonų energija: a) 1950 keV, b) 2250 keV, c) 2500 keV. Eksperimentiniai duomenys adaptuoti pagal [107].

Eksperimentinių ir teorinių atgalinės sklaidos spektrų, gautų dalelių kanaliavimo geometrijoje, atitikimas yra šiek tiek prastesnis nei atsitiktinio kampo atvejais (žr. 35 pav.). Vertinant teorinius spektrus, gautus su idealiai lygiagrečiu pluoštelium, pastebima, kad didelės energijos frontai prieš rezonansinę kreivę pasižymi mažesniu intensyvumu lyginant su eksperimentiniais spektrais. Energinės rezonansinių juostų pozicijos šiais atvejais dalinai atitinka eksperimentines, tačiau stebima žymiai intensyvesnė atgalinė sklaida už rezonansinės juostos. Esant geresniam kanaliavimo efektyvumui, rezonansinės juostos labiau išplinta ir praranda savo formą. Kai teoriniuose skaičiavimuose papildomai modeliuojama kampinė

pluoštelio skėstis, didelės energijos frontai ir rezonansinės juostos gerai atitinka eksperimentines juostas, stebimas ir didesnis teorinių spektrų intensyvumo sumažėjimas po rezonansinių juostų. 1,95 MeV protonų spektruose stebimas geras rezonansinės smailės ($\sim 1,1$ MeV) atitikimas, kai skaitiniame modeliavime įskaitoma pluoštelio skėstis (žr. 35 pav. a). Lyginant su eksperimentiniu spektru egzistuoja didesnis teorinio spektro intensyvumas 1,3 MeV – 1,7 MeV energijos intervale, taip pat didesnis intensyvumas už rezonansinės juostos (0,8 MeV – 0,95 MeV) ir mažesnis intensyvumas mažos energijos srityje ($< 0,7$ MeV). 2,25 MeV protonų indukuotame skaitiškai modeliuotame spektre rezonansinė juosta puikiai atitinka eksperimentinę, tačiau stebimas eksperimentinio ir teorinio spektrų neatitikimas žemesnių energijų srityje ($< 1,55$ MeV). 2,5 MeV energijos protonų indukuotame atgalinės sklaidos spektre stebimas geras teorinės ir eksperimentinės kreivių atitikimas: spektrų forma panaši, o eksperimentinė rezonansinė juosta (1,25 MeV) yra kiek platesnė ir intensyvesnė.

Siekiant įvertinti galimą temperatūros įtaką atgalinės sklaidos spektrui, buvo atlikti atgalinės sklaidos spektro skaitiniai modeliavimai 300 K ir 1200 K gardelės temperatūroje atsižvelgiant į pluoštelio kampinę skėstį ir be jos (žr. 35 pav. b). Vertinant didelės energijos sritį ($> 1,1$ MeV), spektruose stebimas didesnis intensyvumas esant aukštesnei gardelės temperatūrai ir šiek tiek mažesnis intensyvumas už rezonansinės juostos mažos ($< 1,1$ MeV) energijos srityje. Gauta, kad temperatūros padidėjimo efektas nežymiai keičia spektro formą lyginant su kampinės skėsties padidėjimo sukeltais spektrų pokyčiais.



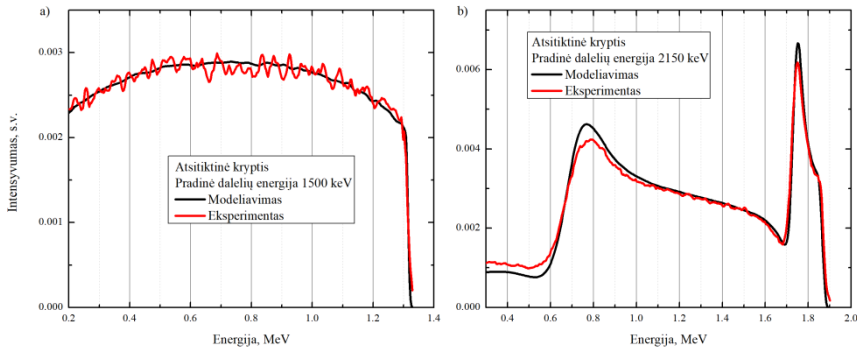
35 pav. Eksperimentiniai ir skaitiškai modeliuoti atgalinės sklaidos spektrai, gauti dalelėms kanaliuojant išilgai $\langle 100 \rangle$ silicio ašies. Krintančiųjų protonų energija: a) 1950 keV, b) 1950 keV esant skirtingoms gardelės temperatūroms, c) 2250 keV, d) 2500 keV. Eksperimentiniai duomenys adaptuoti pagal [107].

4.4.3. Atgalinė sklaida kanaliuojant išilgai $\langle 110 \rangle$ ašies silicijoje

Eksperimentinių ir teorinių atgalinės sklaidos spektrų palyginimas buvo atliktas dalelėms kanaliuojant išilgai $\langle 110 \rangle$ silicio kristalografines ašies. Eksperimentiniai rezultatai adaptuoti pagal [108] šaltinį. Šiuo atveju protonų atgalinės sklaidos spektrai užregistruoti naudojant gryno silicio paviršiaus barjerinį detektorių, sudarantį $\theta_{\text{LAB}} = 170^\circ$ kampą su pluošteliu. Detektoriaus energinė skyra siekė 8 keV. Šiuo atveju autoriai nurodo geresnę nei $0,02^\circ$ kampinę pluoštelio sklaidą.

Eksperimentiniai atsitiktiniu kampu užfiksuoti spektrai ir teoriniai amorfinio silicio spektrai gerai atitinka (žr. 36 pav.). 1,5 MeV protonų teorinis spektras puikiai atitinka eksperimentinį, o 2,15 MeV atveju stebimas kiek prastesnis teorinio spektro atitikimas rezonansinių juostų srityje ($\sim 1,75$ MeV ir $\sim 0,78$ MeV). Šiais atvejais teorinis spektras yra intensyvesnis už eksperimentinį, tačiau pati spektro forma gerai atitinka eksperimentinę kreivę. Lyginant 2,15 MeV atvejį ir Si $\langle 100 \rangle$ 2,25 MeV atvejį (žr.

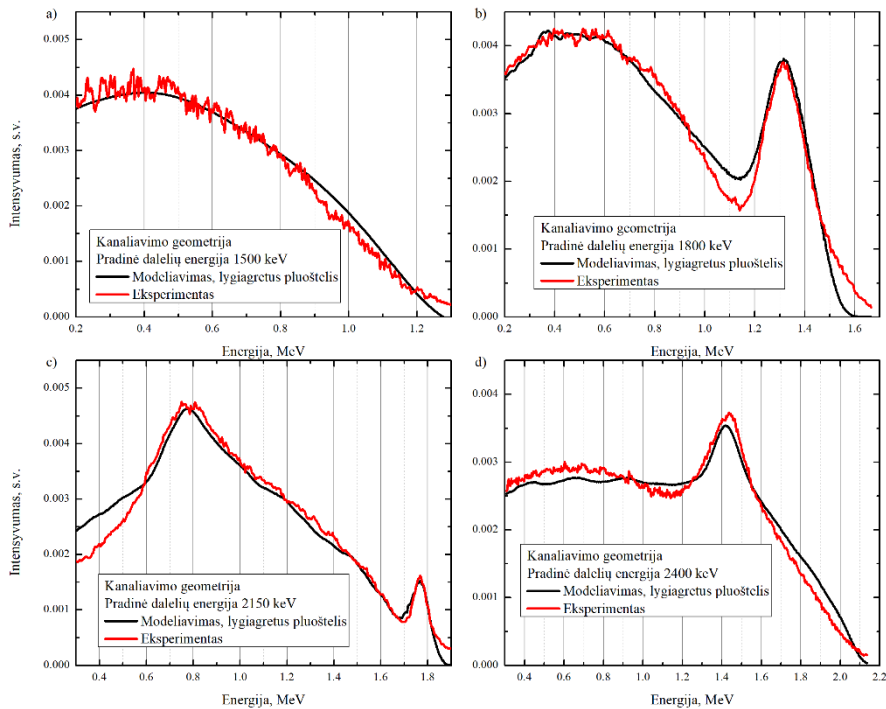
34 pav. b), šiuo atveju eksperimentinis spektras teisingiau atitinka rezonansinio skerspjūvio pokyti (žr. 31 pav.).



36 pav. Eksperimentiniai ir skaitiškai modeliuoti atgalinės sklaidos spektrai nuo amorfinio Si. Krintančiųjų protonų energija: a) 1500 keV, b) 2150 keV. Eksperimentiniai duomenys adaptuoti pagal [108] šaltinį.

Skaitiškai modeliuojant kanaliavimo geometrijos spektrus buvo pastebėta, kad geriausiai eksperimentinius spektrus atitinkantys teoriniai spektrai buvo gauti modeliuojant lygiagrečių dalelių pluoštelį, t.y. be kampinės skėsties (žr. 37 pav.). Šiuo atveju spektrai su kampine skėstimi nepateikiami. Pagrindinės spektrų smailės sąlyginai gerai skaitiškai modeliuojamos. Vienas įdomus eksperimentinių spektrų ypatumas yra ilga didelės energijos uodega prieš rezonansines juostas. Teoriniuose spektruose ši uodega nestebima, o jos atsiradimas gali būti paaiškintas eksperimentinių spektrų skaitmenizavimo netikslumu arba žymia pradinės dalelių energijos variacija. Varijuojant pluoštelio energijai, atgalinę sklaidą nuo bandinio paviršiaus atitinkantis spektro frontas nuožulnėja, todėl nelieka stataus krašto. 1,5 MeV energijos protonų eksperimentiniame ir teoriniame spektruose rezonansinės juostos nestebimos ir abiejų spektrų forma praktiškai identiška. 1,8 MeV energijos protonų spektruose energinės eksperimentinio ir teorinio juostų pozicijos sutampa, taip pat sutampa ir intensyvumai didžiojoje dalyje energijos intervalo. Didelės energijos srityje egzistuoja eksperimentinio spektro uodega. Papildomai stebimas didesnis teorinio spektro intensyvumas už rezonansinės juostos (1,0 MeV – 1,2 MeV) susijęs su geresniu teoriniu kanaliavimo efektyvumu. 2,15 MeV energijos protonams stebimas puikus teorinio ir eksperimentinio spektrų atitikimas 0,6 MeV – 1,8 MeV energijos intervale. Pagrindiniai skirtumai nuo eksperimentinio spektro yra nežymiai platesnė rezonansinė juosta ties

~1,78 MeV bei didesnis mažos energijos regiono intensyvumas ($< 0,6$ MeV). 2,4 MeV protonų eksperimentinio ir teorinio spektrų palyginimas rodo, kad rezonansinės juostos forma ir intensyvumas puikiai skaitiškai modeliuojami, tačiau teoriškai įvertinamas didesnis spektro intensyvumas prieš rezonansinę juostą ($> 1,5$ MeV) ir nežymus skaitiškai modeliuoto ir eksperimentinio spektrų intensyvumų neatitikimas už rezonansinės juostos ($< 1,3$ MeV). Apibendrinant visus kanaliavimo išilgai $\langle 110 \rangle$ ašies atvejus, stebimas ganėtinai geras teorinių ir eksperimentinių spektrų atitikimas.



37 pav. Eksperimentiniai ir skaitiškai modeliuoti atgalinės sklaidos spektrai, gauti dalelėms kanaliuojant išilgai $\langle 110 \rangle$ Si ašies. Krintančiųjų protonų energija: a) 1500 keV, b) 1800 keV, c) 2150 keV, d) 2400 keV.

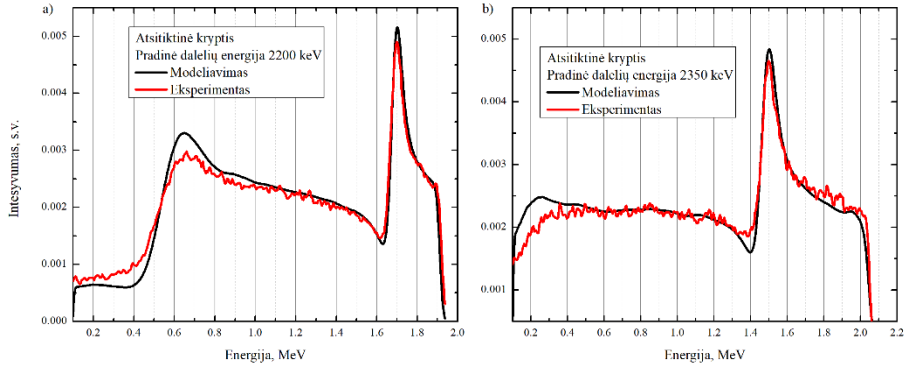
Eksperimentiniai duomenys adaptuoti pagal [108].

4.4.4. Atgalinė sklaida kanaliuojant išilgai $\langle 111 \rangle$ ašies silicyje

Teoriniai protonų atgalinės sklaidos spektrai nuo silicio kristalo išilgai $\langle 111 \rangle$ kristalografinės ašies buvo įvertinti 1,8 MeV – 2,4 MeV energijų intervale. Eksperimentiniai duomenys buvo adaptuoti pagal [109] šaltinį. Eksperimento metu gryno silicio barjerinis detektorius sudarė $\theta_{LAB} = 160^\circ$

kampą su pluošteliu, detektoriaus energinė skyra siekė 18 keV. Eksperimentinė pluoštelio kampinė skėstis nenurodyta. Atliekant amorfinės medžiagos spektrų matavimą, bandinys buvo nuolat sukamas apie pluoštelio ašį pavertus jį nuo kanaliavimo ašies. Teoriniame tyrime naudota pluoštelio skėstis siekė $0,07^\circ - 0,09^\circ$.

Eksperimentinių ir teorinių atgalinės sklaidos spektrų palyginimas rodo panašų atitikimą kaip ir kitais atsitiktinio kampo (beveik amorfinio bandinio) atvejais (žr. 38 pav.). Teorinės rezonansinių juostų energinės pozicijos beveik idealiai atitinka eksperimentines, o pagrindiniai skirtumai stebimi spektrų intensyvume ties rezonansinėmis juostomis. Vertinant 2,2 MeV protonų spektrus pastebima, kad skaitiškai modeliuotas spektras yra intensyvesnis ties abejomis rezonansinėmis juostomis (1,7 MeV ir 0,65 MeV), o bendra spektro forma puikiai atitinka eksperimentinę. Kaip ir ankstesniais panašios energijos atvejais (2,15 MeV išilgai $\langle 110 \rangle$ silicyje ir 2,25 MeV išilgai $\langle 100 \rangle$ silicyje), žemos energijos rezonansinė juosta eksperimentiniuose spektruose išplinta į mažesnių energijų sritį, o skaitinio modeliavimo kreivė išlieka statesnė. 2,35 MeV energijos protonų spektruose egzistuoja panašus atitikimas tarp eksperimentinio ir skaitiškai modeliuoto spektrų (žr. 38 pav. b). Modeliuotas spektras pasižymi didesniu intensyvumu ties rezonansine juosta (1,5 MeV) ir žemos energijos srityje ($< 0,4$ MeV) bei mažesniu intensyvumu didelės energijos fronte (1,8 MeV – 2,0 MeV). Eksperimentiniame spektre taip pat stebimas santykinai mažas intensyvumo sumažėjimas po rezonansinės juostos (1,4 MeV) lyginant su skaitiškai modeliuotu spektru ir su tolimesniu plato regionu ($< 1,3$ MeV). Tokia eksperimentinio spektro neatitiktis gali būti paaiškinta spektro skaitmenizavimo netikslumu.

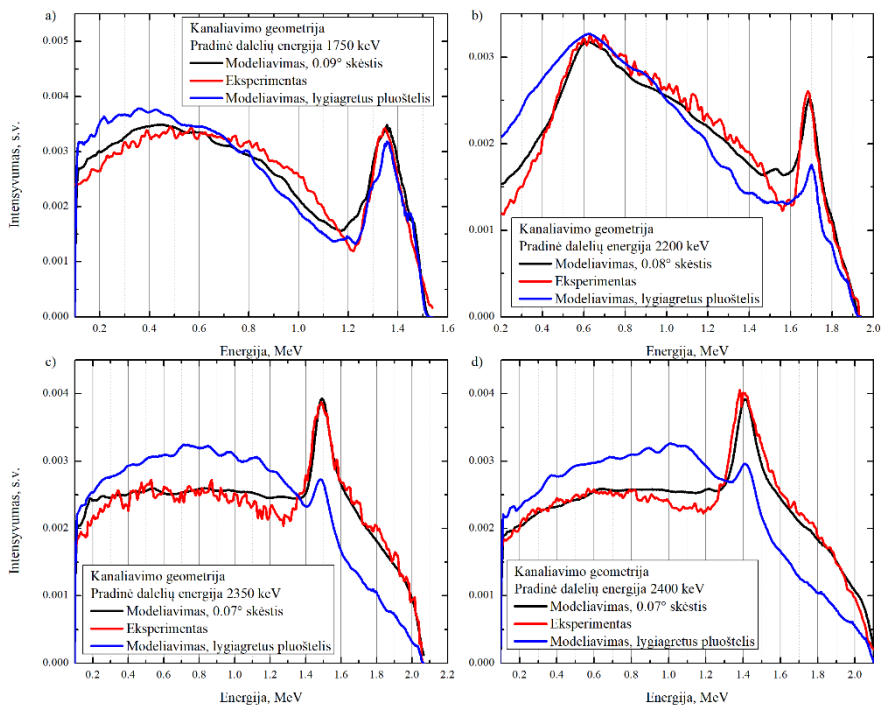


38 pav. Eksperimentiniai ir skaitiškai modeliuoti atgalinės sklaidos spektrai nuo amorfinio Si. Krintančiųjų protonų energija: a) 2200 keV, b) 2350 keV. Eksperimentiniai duomenys adaptuoti pagal [109].

Teoriniai atgalinės sklaidos spektrai dalelėms kanaliuojant išilgai $\langle 111 \rangle$ ašies buvo įvertinti naudojant 4 skirtingas energijas (žr. 38 pav.). Šiuo atveju spektruose puikiai atsispindi kampinės pluoštelio skėsties įtaka. Kai skaitiniame modeliavime naudojamas lygiagretus dalelių pluoštelis, spektruose stebimas mažesnis rezonansinių smailių intensyvumas ir didesnis spektro intensyvumas žemesnių energijų srityje. Vertinant skirtingų protonų energijų spektrus, pastebima, kad kai pradinė dalelių energija yra mažesnė už 2.35 MeV, teorinių atgalinės sklaidos spektrų intensyvumas už rezonansinių juostų yra beveik lygus eksperimentiniam intensyvumui, tačiau stebimas bendras kreivių pasistūmimas į mažesnių energijų sritį. Didesnės energijos spektruose egzistuoja didesnis teorinių spektrų intensyvumas už rezonansinių juostų, lyginant su eksperimentiniais spektrais. Apibendrinant, atgalinės sklaidos spektrai, kai naudojamas lygiagretus dalelių pluoštelis, prasčiau atitinka eksperimentinius spektrus dėl visada eksperimentiškai egzistuojančios pluoštelio kampinės skėsties.

Lyginant skaitinio modeliavimo spektrus, gautus naudojant kampinę pluoštelio skėstį, ir eksperimentinius spektrus, stebimas geras atitikimas. Visais atvejais didelės energijos frontas iki rezonansinės juostos pozicijos yra modeliuojamas puikiai – energinės spektrų pradžios pozicijos ir intensyvumas atitinka eksperimentinius parametrus. Rezonansinių juostų intensyvumas ir plotis taip pat puikiai atitinka eksperimentinius spektrus. Pagrindiniai skirtumai tarp eksperimentinių ir teorinių spektrų, kaip ir ankstesniais atvejais, matomi mažos energijos srityse iš karto už rezonansinių juostų. Visais atvejais stebimas didesnis teorinio spektro intensyvumas. Vertinant pavienius atvejus išskiriamas 1,75 MeV atvejis, kai

spektras už rezonansinės juostos pozicijos yra tarsi pastumtas į žemesnių energijų pusę per ~60 keV. Tai gali būti dėl netinkamos pradinės pluoštelio energijos teoriniame vertinime. Kitais atvejais postūmis nestebimas. Apibendrinant, eksperimentinius spektrus gerai atitinkantys teoriniai spektrai gaunami naudojant kampinę pluoštelio skėstį. Tai rodo, kad eksperimentiniame spektrų registravime pluoštelis nebuvo idealiai lygiagretus.



39 pav. Eksperimentiniai ir skaitiškai modeliuoti atgalinės sklaidos spektrai, gauti dalelėms kanaliuojant išilgai $\langle 111 \rangle$ Si ašies. Krintančiųjų protonų energija: a) 1750 keV, b) 2200 keV, c) 2350 keV, d) 2400 keV.

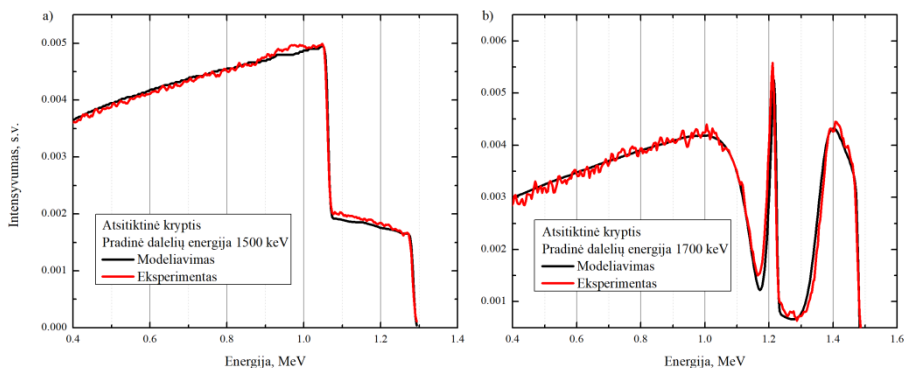
Eksperimentiniai duomenys adaptuoti pagal [109].

4.4.5. Atgalinė sklaida nuo silicio karbido kristalo

Protonų atgalinės sklaidos spektrai buvo įvertinti 4H ir 6H SiC kristalui išilgai optinės ašies (c–ašis) $\langle 0001 \rangle$. Eksperimentiniai duomenys adaptuoti pagal [110] šaltinį. Eksperimentų metu naudotas silicio barjerinis detektorius, sudarantis $\theta_{\text{LAB}} = 170^\circ$ kampą su krintančiu pluošteliu. Detektoriaus energinė skyra protonams siekė 8 keV, o pluoštelio kampinė

skėstis buvo geresnė nei $0,05^\circ - 0,07^\circ$. Teoriniuose skaičiavimuose naudota pluoštelio kampinė skėstis $0,075^\circ - 0,08^\circ$.

Teoriniai atgalinės sklaidos spektrai, gauti nuo amorfinio SiC bandinio, gerai sutampa su eksperimentiniais (žr. 40 pav.). Šiuo atveju pateikti 1,5 MeV ir 1,7 MeV energijos protonų indukuoti atgalinės sklaidos spektrai. Pirmuoju atveju eksperimentinis spektras ties frontu, atitinkančių sklaidą nuo anglies atomų (1,1 MeV – 1,3 MeV), yra labiau intensyvus nei teorinis, tačiau energinės pozicijos ir suminis Si ir C juostų intensyvumas puikiai atitinka eksperimentines vertes. Didesnės energijos atveju teorinis spektras puikiai atitinka eksperimentinį. Pagrindinis skirtumas yra šiek tiek didesnis eksperimentinės kreivės intensyvumas už rezonansinės juostos (1,18 MeV).



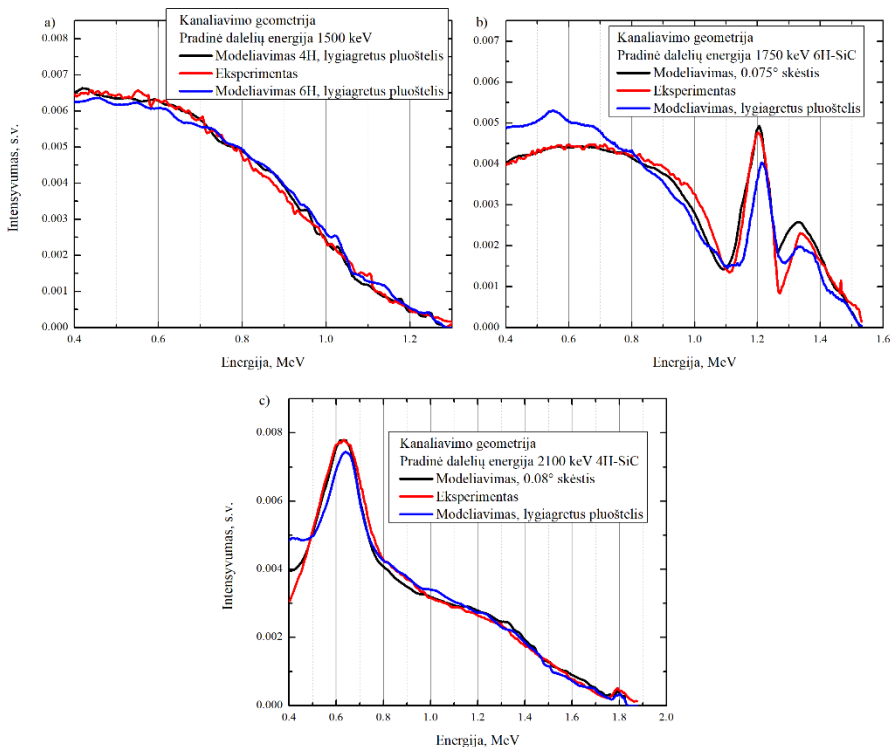
40 pav. Eksperimentiniai ir skaitiškai modeliuoti atgalinės sklaidos spektrai nuo amorfinio SiC. Krintančiųjų protonų energija: a) 1500 keV, b) 1700 keV. Eksperimentiniai duomenys adaptuoti pagal [110].

Teoriniai atgalinės sklaidos spektrai, gauti vertinant 1.5 MeV – 2.1 MeV energijos protonų sąveiką su SiC kanaliavimo geometrijoje, taip pat gerai atitinka eksperimentinius rezultatus (žr. 41 pav.). Kaip ir anksčiau, šiuo atveju pateikiami skaitinio modeliavimo rezultatai, kai modeliuojama dalelių kampinė skėstis ir lygiagretus pluoštelis. Vertinant atgalinės sklaidos spektrus, kai skaitiškai modeliuojamas lygiagretus dalelių pluoštelis, mažiausios energijos atveju (1,5 MeV) spektras praktiškai nesiskiria nuo eksperimentinio. Šiuo atveju eksperimentinių duomenų šaltinis nedetalizuoja, kuris SiC politipas buvo naudojamas spektrui gauti, todėl skaitiškai modeliuoti abu atvejai. Lyginant 6H ir 4H kreives geresnis atitikimas eksperimentiniam spektrui gaunamas naudojant 4H SiC politipą.

1,75 MeV energijos protonų indukuoto teorinio spektro forma žymiai skiriasi nuo eksperimentinio spektro formos, kai naudojamas lygiagretus

pluoštelis: anglies (~1,35 MeV) ir silicio (~1,2 MeV) rezonansinės juostos yra mažiau intensyvesnės nei eksperimentinės, taip pat skiriasi jų forma, o plato regione (< 1,0 MeV) teorinis spektras pasistūmęs į mažesnių energijų sritį. Kai skaitiniame modeliavime naudojama pluoštelio skėstis, teorinis spektras gerai atitinka eksperimentinį beveik visame energijų diapazone. Pagrindinis skirtumas yra energijos sritis tarp anglies ir silicio rezonansinių juostų (1,2 MeV – 1,35 MeV), kur teorinis spektras yra žymiai intensyvesnis už eksperimentinį. Silicio rezonansinė smailė (1,2 MeV) šiuo atveju puikiai skaitiškai modeliuojama.

2,1 MeV energijos protonų teoriniai spektrai su pluoštelio skėstimi ir lygiagrečiu pluošteliu yra panašūs – žymiai skiriasi tik rezonansinė juosta (~0,62 MeV), kur lygiagretaus pluoštelio spektro intensyvumas yra mažesnis už eksperimentinį. Kai modeliavime naudojama pluoštelio skėstis, teorinis spektras puikiai atitinka eksperimentinį visame energijų diapazone.

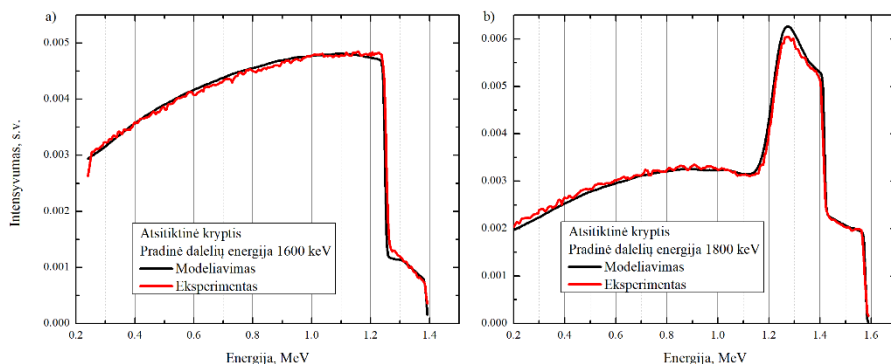


41 pav. 1,5 MeV (a), 1,75 MeV (b) ir 2,1 MeV (c) energijos protonų indukuoti eksperimentiniai ir skaitiškai modeliuoti atgalinės sklaidos spektrai, gauti dalelėms kanaliuojant išilgai <0001> SiC ašies. Eksperimentiniai duomenys adaptuoti pagal [110].

4.4.6. Atgalinė sklaida nuo silicio dioksido kristalo

Eksperimentiniai protonų atgalinės sklaidos spektrai nuo silicio dioksido kristalo, dalelėms kanaliuojant išilgai optinės ašies, adaptuoti pagal [111] šaltinį. Eksperimentuose naudotas silicio barjerinis detektorius, kurio energinė skyra protonams siekė 8 keV, o detektorius sudarė $\theta_{\text{LAB}} = 170^\circ$ kampą su pluošteliu. Maksimali pluoštelio kampinė skėstis siekė $0,07^\circ$. Amorfinės medžiagos spektrai užregistruoti bandinį pasukus toliau nuo kristalinės ašies ir atliekant periodinius pasukimus aplink pluoštelio ašį. Teoriniai skaičiavimai buvo atliekami su $0,05^\circ - 0,06^\circ$ kampine skėstimi.

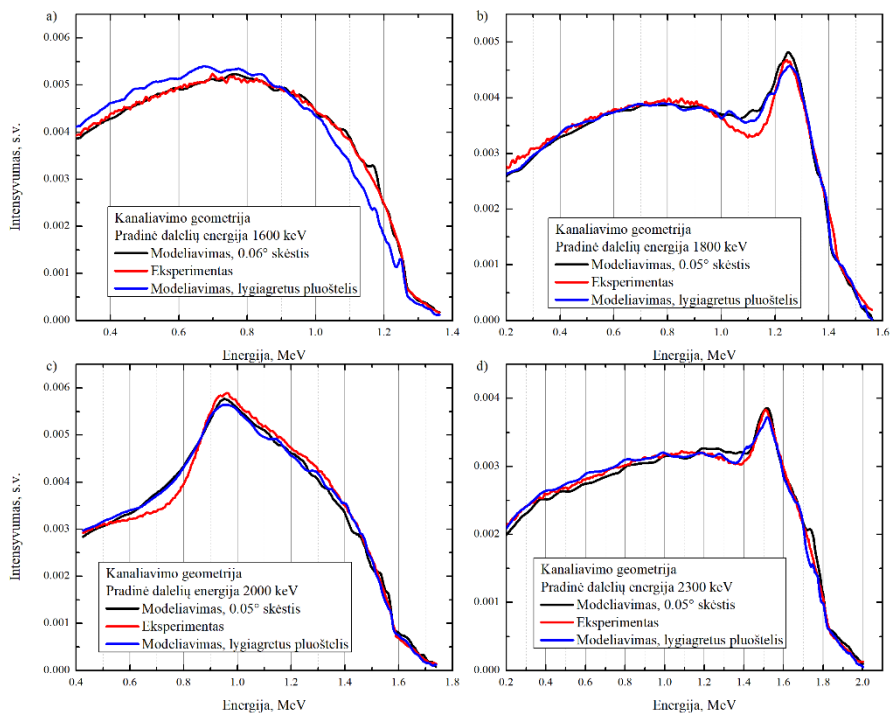
Teoriniai atgalinės sklaidos spektrai, gauti protonams sąveikaujant su amorfiniu silicio dioksidu, puikiai sutampa su eksperimentiniais spektrais (žr. 42 pav.). Energinės juostų pozicijos ir intensyvumas sutampa tiek 1,6 MeV, tiek ir 1,8 MeV atvejais. Kiek didesnis skirtumas stebimas 1,8 MeV atveju, kur skaitiškai modeliuojama rezonansinė kreivė ties 1,25 MeV yra intensyvesnė už eksperimentinę kreivę.



42 pav. 1,6 MeV (a) ir 1,8 MeV (b) energijos protonų indukuoti eksperimentiniai ir skaitiškai modeliuoti atgalinės sklaidos spektrai nuo amorfinio SiO₂. Eksperimentiniai duomenys adaptuoti pagal [111].

Kanaliavimo atgalinės sklaidos spektrai buvo gauti naudojant 4 dalelių pluoštelio energijas (žr. 43 pav.). Kaip ir ankstesniais atvejais, atgalinės sklaidos spektrai, gauti naudojant lygiagretų pluoštelį, skiriasi nuo eksperimentinių spektrų, tačiau SiO₂ bandinio atveju skirtumas yra minimalus. Vertinant 1,6 MeV energijos atvejį, kai skaitiškai modeliuojama pluoštelio skėstis, teorinis spektras puikiai atitinka eksperimentinį visame energijų diapazone (žr. 43 pav. a). Naudojant lygiagretų protonų pluoštelį sklaidą nuo paviršiaus atitinkanti didelės energijos sritis (1,25 MeV –

1,35 MeV) atitinka eksperimentinį spektrą, tačiau žemesniame energijos intervale spektras yra pasistūmęs į žemesnių energijų pusę. 1,8 MeV protonų atveju skaitinio modeliavimo spektrai su lygiagrečiu pluošteliu ir su kampine skėstimi gerai atitinka eksperimentinį spektrą, o skirtumas tarp abiejų teorinių kreivių yra minimalus (žr. 43 pav. b). Pagrindinis skirtumas, lyginant su eksperimentine kreive, yra 1,0 MeV – 1,2 MeV energijos intervale, kur stebimas eksperimentinio spektro mažesnis intensyvumas. Vertinant 2 MeV energijos protonų atvejį stebima panaši tendencija, kai lygiagretus ir pluoštelis su kampine skėstimi indukuoja labai panašius spektrus (žr. 43 pav. c). Lyginant su eksperimentiniu spektru stebimas geras atitikimas 0,9 MeV – 1,75 MeV diapazone, kur vienintelis skirtumas yra kiek didesnis eksperimentinės kreivės intensyvumas. Kaip ir 1,8 MeV protonų atveju, šiuo atveju taip pat stebimas padidėjęs teorinių kreivių intensyvumas energiniame diapazone už rezonansinės juostos ($< 0,85$ MeV). Didžiausios pradinės energijos (2,3 MeV) atveju taip pat stebimas puikus skaitiškai modeliuotų spektrų sutapimas su eksperimentiniu spektru visame energijų intervale. Lyginant skaitiškai modeliuotus spektrus, gautus su pluoštelio skėstimi ir be jos, stebimas šiek tiek geresnis rezonansinės juostos atitikimas ($\sim 1,5$ MeV), bet prastesnis spektro srities už rezonansinės juostos (1,2 MeV – 1,4 MeV) atitikimas naudojant kampinę skėstį. Šiuo atveju taip pat egzistuoja kita rezonansinė kreivė, kuri atitinka skerspjūvio pokytį ties 2,09 MeV (žr. 31 pav.), kai tuo tarpu mažesnių energijų spektruose esanti rezonansinė kreivė atitinka skerspjūvio pokytį ties 1,66 MeV. 2,3 MeV energijos protonų atveju spektruose visiškai nepasireiškia žemesnės energijos rezonansinė juosta, o stebima tik aukštesnės energijos rezonansinė juosta.



43 pav. Eksperimentiniai ir skaitiškai modeliuoti atgalinės sklaidos spektrai, gauti dalelėms kanaliuojant išilgai $\langle 0001 \rangle$ SiO₂ ašies. Krintančiųjų protonų energija: a) 1600 keV, b) 1800 keV, c) 2000 keV, d) 2300 keV.

Eksperimentiniai duomenys adaptuoti pagal [11].

4.4.7. Atgalinė sklaida nuo deimanto kristalo

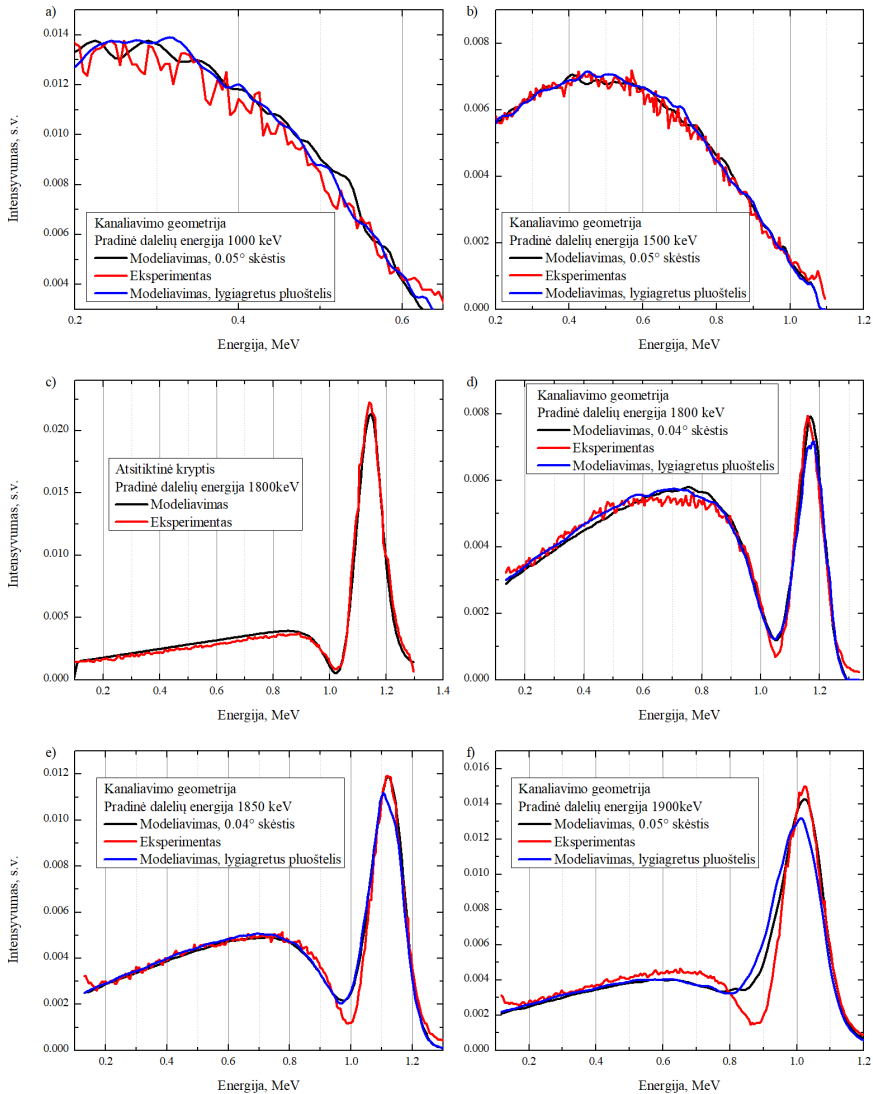
Eksperimentiniai protonų atgalinės sklaidos spektrai nuo deimanto kristalo, dalelėms kanaliuojant išilgai $\langle 100 \rangle$ ašies, adaptuoti pagal [112] šaltinį. Šiuo atveju spektrai buvo gauti naudojant silicio barjerinį detektorių, kuris sudarė $\theta_{\text{LAB}} = 160^\circ$ kampą su pluošteliu. Detektoriaus energinė skyra ir pluoštelio kampinė skėstis nenurodyta. Amorfinės medžiagos spektrai užregistruoti bandinį pasukus toliau nuo kristalinės ašies ir matuojant periodiškai sukant bandinį aplink pluoštelio ašį. Teoriniame vertinime pasirinkta 8 keV detektoriaus energinė skyra ir kampinė skėstis diapazone $0,04^\circ - 0,05^\circ$.

Eksperimentinis ir skaitiškai modeliuotas atgalinės sklaidos spektrai, gauti atstitiktinio kampo sąlygomis, gerai sutampa tarpusavyje (žr. 44 pav. c). Pagrindiniai teorinio spektro skirtumai yra kiek didesnis

intensyvumas 0,2 – 1,0 MeV diapazone bei šiek tiek mažiau intensyvesnė rezonansinė juosta (~1,12 MeV).

Vertinant dalelių kanaliavimo atvejus, stebimas geras skaitiškai modeliuotų ir eksperimentinių spektrų atitikimas, tačiau didėjant pradinei dalelių energijai jis prastėja. 1,0 MeV ir 1,5 MeV energijos protonų indukuotuose atgalinės sklaidos spektruose rezonansinės juostos nepasireiškia (žr. 44 pav. a ir b). Skaitinio modeliavimo būdu gauti spektrai gerai sutampa su eksperimentiniais spektrais. Lyginant lygiagretaus pluoštelio spektrus ir spektrus su $0,05^\circ$ kampine pluoštelio skėstimi, stebimi labai nežymūs skirtumai. Esant mažai pradinei dalelių energijai kritinis kanaliavimo kampas yra didesnis, todėl net esant pluoštelio skėščiai, dalelės kanaliuoja neprarasdamos daug energijos ir atitinkamų spektrų forma pakinta nežymiai.

Atgalinės sklaidos spektruose, gautuose naudojant 1,8 MeV – 1,9 MeV energijos protonų pluoštelį (žr. 44 pav. d – f) stebima viena anglies atomų rezonansinė juosta, atitinkanti skerspjuvio rezonansą ties 1,73 MeV (žr. 31 pav.). Teoriniai spektrai su pluoštelio skėstimi neblogai atitinka eksperimentinius, tačiau atitikimas suprastėja didėjant pradinei protonų energijai. 1,8 MeV energijos protonų atveju teorinės kreivės intensyvumas < 1,0 MeV diapazone yra šiek tiek didesnis nei eksperimentinio spektro, o skerspjuvio sumažėjimą atitinkantis regionas (~1,07 MeV) gerai atitinka eksperimentinį intensyvumą. Rezonansinė juosta šiuo atveju puikiai skaitiškai modeliuojama.



44 pav. Eksperimentiniai ir skaitiškai modeliuoti protonų atgalinės sklaidos spektrai nuo deimanto kristalo. Spektuose pateiktas amorfinės medžiagos atvejis (c) ir atvejai, dalelėms kanaliuojant išilgai $\langle 100 \rangle$ ašies, kai pradinė energija yra: a) 1000 keV, b) 1500 keV, d) 1800 keV, e) 1850 keV, f) 1900 keV. Eksperimentiniai duomenys adaptuoti pagal [112].

Vertinant didelės energijos regioną, atitinkantį sklaidą nuo bandinio paviršiaus (spektre energija $> 1,3$ MeV), pastebimas teorinio spektro neatitikimas eksperimentiniam. Didesnės pradinės energijos atvejais šis sklaidą nuo paviršiaus atitinkantis efektas eksperimentiniuose spektruose

pasireiškia silpniau. Labiausiai tikėtina to priežastis yra eksperimentinio spektro skaitmenizavimo netikslumas. Didėjant pradinei pluoštelio energijai pasireiškia daugiau skirtumų tarp skaitiškai modeliujamo ir eksperimentinio spektrų. Rezonansinių juostų priekiniai frontai gerai atitinka eksperimentinius frontus, tačiau stebimas neatitikimas už rezonansinių juostų, kur eksperimentiniuose spektruose matomi skerspjūvio sumažėjimai. Labiausiai tikėtina to priežastis yra mažesnė nebekanaliojančių dalelių dalis, lyginant su eksperimentu. Kai skaitiniame modeliavime naudojamas lygiagretus pluoštelis, rezonansinių juostų intensyvumas yra mažesnis nei eksperimentinių, o žemų energijų sritys labai panašios į atvejus, kai modeliujama pluoštelio skėstis.

4.5. Kanaliavimo atgalinės sklaidos modelio rezultatų apibendrinimas

Šio darbo metu sukurtas atgalinės sklaidos spektrų skaitinio modeliavimo modelis buvo validuotas 1 MeV – 2,5 MeV energijų diapazone protonams kanaliuojant silicio, silicio dioksido, silicio karbido ir deimanto kristaluose. Eksperimentinių ir teorinių spektrų palyginimas parodė, kad sukurtas modelis gali pakankamai tiksliai įvertinti teorinį atgalinės sklaidos spektrą, kai krintančiųjų dalelių energijos srityje nėra rezonansinių skerspjūvių. Kai krintančiųjų dalelių energijos diapazone egzistuoja rezonansiniai skerspjūviai, teorinis spektras stipriai priklauso nuo naudojamų rezonansinių skerspjūvių verčių bei nuo pluoštelio skėsties. Kadangi atgalinės sklaidos spektrą indukuoja greitai kanaliuoti nustojančios dalelės, esant labiau lygiagrečiam pluošteliiui ir geresniam kanaliavimo efektyvumui, rezonansinės juostos išplinta ir tampa mažiau išreikštos. Dėl išplitusių rezonansinių juostų skerspjūvio sumažėjimas tampa mažiau pastebimas. Pagrindinės sąlygos, ribojančios kanaliavimo efektyvumą yra kristalo kokybė, arba defektų kiekis ir tipas, dalelių pluoštelio energija, kryptis kristalografinės ašies atžvilgiu bei pluoštelio kampinė skėstis ir kritimo kampas.

Vertinant atgalinės sklaidos spektro intensyvumą 2 MeV protonams, kanaliuojantiems išilgai $\langle 100 \rangle$ kristalografinės ašies silicyje, gauta, kad kintant gardelės temperatūrai nuo 100 K iki 1400 K maksimalus spektro intensyvumas pakinta per 40 % lygiagretaus pluoštelio atveju ir per 25 % kai naudojama $0,1^\circ$ kampinė pluoštelio skėstis. Lyginant su amorfinės medžiagos spektru, lygiagretaus dalelių pluoštelio, kanaliuojančio išilgai $\langle 100 \rangle$ ašies, indukuoto spektro maksimalus intensyvumas siekia tik 20 %.

Esant $0,1^\circ$ kampinei skėščiai, maksimalus intensyvumas siekia $\sim 47\%$ amorfinės medžiagos lygio. Didėjant kampinei skėščiai maksimalus intensyvumas didėja, spektro forma panašėja į amorfinį. Lyginant spektrus, gautus amorfinėmis ir kanaliavimo sąlygomis, kanaliuojančių dalelių spektrų rezonansinės juostos yra platesnės, silpnai išreikštos formos bei stebimas juostos maksimumo pasislinkimas į žemesnių energijų sritį. Skaitinis modeliavimas parodė, kad rezonansinės juostos forma, intensyvumas, energinė pozicija bei spektro regionas, atitinkantis sumažėjusį rezonansinės reakcijos skerspjūvį, yra geras kanaliavimo efektyvumo rodmuo. Kuo labiau išreikšta rezonansinė juosta – tuo blogesnis kanaliavimo efektyvumas, nes dalelės labiau priartėja prie atominių ašių ir išauga atgalinės sklaidos skerspjūvis, o kartu ir dalelių energijos nuostoliai.

Apibendrinant, šio darbo metu sukurtas teorinis kanaliuojančių dalelių atgalinės sklaidos spektrų simuliacinio modelis geba pakankamai tiksliai modeliuoti eksperimentinius spektrus. Interpretuojant skaitinio modeliavimo metu gautus rezultatus būtina atsižvelgti į tai, kad šie spektrai gauti skaitiškai modeliuojant kanaliavimo procesą, o ne tinkinant eksperimentinius spektrus, todėl tam tikri teorinių ir eksperimentinių spektrų skirtumai neišvengiami.

IŠVADOS

1. Skaitiškai modeliuojant jonų RBS spektrus būtina naudoti eksperimentines sąlygas atitinkančias dalelių stabdomųjų gebų bibliotekas – ličio jonų atveju tokį patį HfO_2 spektrą generuodavo 1320 TFU medžiagos naudojant ICRU bei 1470 TFU naudojant SRIM stabdomąsias gebas. Eksperimentinį spektrą labiausiai atitinkantis spektras gaunamas naudojant SRIM stabdomųjų gebų biblioteką.
2. Didėjant silicio bandinio temperatūrai nuo 100 K iki 1000 K maksimali kristalinio potencialo vertė sumažėja beveik 2 kartus – nuo 106 eV iki 57 eV, o $0,1^\circ$ kampu pasukto bandinio atveju didelės energijos kanaliuojančių dalelių kiekis sumažėja taip pat beveik 2 kartus – nuo 22 % iki 12 %. Tai rodo, kad bandinio temperatūros didėjimas tiesiogiai mažina didelę energiją turinčių dalelių dalį kanaliavimo eksperimente.
3. Modifikuotas dalelių kanaliavimo modelis leidžia įvertinti kanaliuojančių protonų ir deuteronų energijos nuostolius geresniu nei 20 % nuokrypiu nuo eksperimentinių verčių 1 – 20 MeV energijų intervale silicio, germanio ir galio arsenido kristaluose. Vidutinis skirtumas nuo eksperimentinių verčių siekė 10 %, o nuokrypiai didėja mažėjant dalelių energijai dėl augančių stabdomųjų gebų skirtumų.
4. Lyginant skaitiškai modeliuotus 2 MeV energijos protonų indukuotus atgalinės sklaidos spektrus gauta, kad bandinio temperatūros pokytis nuo 100 K iki 1400 K lemia 40 % ir 25 % spektro intensyvumo padidėjimus lygiagrečiau ir $0,1^\circ$ kampinę skėstį turinčio pluoštelio atvejais. Esant tai pačiai temperatūrai, lygiagrečiau ir $0,1^\circ$ kampinę skėstį turinčio pluoštelių indukuoti spektrai ne tik pasižymi kitokia forma, tačiau bendras intensyvumas pakinta daugiau nei 2 kartus, todėl kampinės skėsties didėjimas daro žymiai didesnius pokyčius atgalinės sklaidos spektrams nei didėjanti bandinio temperatūra.

SUMMARY

Introduction

The properties of semiconductors are greatly influenced and changed by the impurities, dopants, and defects, thus improvements and studies of these types of materials rely on the research of the defect evolution processes. There are many methods to study the evolution on macro and micro scales: Raman spectroscopy [1], Secondary Ion Mass Spectroscopy (SIMS) [2], X-Ray Diffraction (XRD) [3], Ion Beam Analysis (IBA) [4] and others. Each of these techniques has its advantages and drawbacks – from destructive nature (e.g. SIMS) to low penetration depth (e.g. Raman spectroscopy). The most popular methods of IBA are Rutherford backscattering (RBS), Particle Induced X-ray Emission (PIXE), and Elastic Recoil Detection (ERD) spectroscopies. These methods rely on the interaction of charged particles with the material atoms, the detection of the primary (backscattered) or the secondary (generated) particles, and the interpretation of the energy spectrum. For crystalline materials, the sensitivity of experiments greatly increases when measurements are performed in particle channeling geometry [5], [6]. Particle channeling is a process when the particle beam is travelling almost parallel to the crystallographic axis of an ordered crystalline structure. The particles are then focused between the strings or planes of atoms influenced only by the small angle collisions [7]. This region contains a rather low charge density (both of electrons and nuclei) and the particles lose less energy when compared to amorphous materials. Also, due to low charge density in the center of the channel, the probability of scattering and nuclear reaction from the target atom contained within the string of atoms is significantly decreased [8]–[10]. This gives a higher particle penetration depth and the focusing of the particle beam [11]. Due to the focusing of the beam, the particles that channel are more likely to interact with impurities or defects that are present in the center of these channels. The ion beam analysis methods are capable of studying the quality of the crystal lattices, ion implantation-induced displacement damage, and implanted ion profiles, lattice impurity distribution, defect annihilation, and other process when particle channeling phenomenon is utilized [5], [6], [12]–[15].

Electronic energy losses of channeled particles are primarily dependent on the local electron concentration [16]. As such, they are particularly sensitive to the channeling efficiency and the focus of the beam [17], [18].

The channeling efficiency essentially represents the probability that a particle within the sample will suffer only small-angle collisions, resulting in significantly lower energy loss compared to amorphous materials. In amorphous materials, the local electron density is assumed to be constant regardless of the particle position, and the energy loss is evaluated based on the linear stopping power of the target material. In contrast, the energy loss of channeled particles depends on the particle track and how closely they approach the increased local electron concentration. Therefore, special treatment is needed to evaluate the energy loss. The particle channeling process can be treated analytically [19] or based on computer simulations. Modern simulations of particle transportation utilize molecular dynamics (MD) [20], [21] or binary collision approximation techniques [22]–[24]. Simulations based on MD are more detailed and precise, as equations of motion are solved for the whole system of interacting particles (both incident particle and target atoms), however, this approach is more computationally complex and mostly used for low energy particles (< 1 MeV). For high-energy particles, a more sophisticated and less complex approach is used. This technique is the binary collision approximation technique, where at any given moment the interaction between an incident particle and a single target atom is simulated.

The major difficulty that occurs during the ion beam analysis of samples is the interpretation of the acquired spectra. Contrary to the strictly defined energy levels in nuclear reaction or PIXE analysis, the backscattering spectrum contains no such levels and the energy of the detected particle depends on several conditions, such as particle beam parameters, the sample used in the analysis, the geometry of the experiment, properties of the detector, etc. In case of complex samples, the interpretation of spectra becomes extremely difficult without the use of a dedicated simulation or fitting tool. Such tools allow extracting essential information from the sample: element composition, profile, properties of structure, etc. As most of the ion beam analysis experiments are performed with a high energy particle beam (1 – 5 MeV), the majority of simulation and/or fitting tools are based on the Monte Carlo binary approximation method. Currently, several tools are widely used in the industry (DataFurnace WiNDF [25], SIMNRA [26], WDepth [27], RUMP [28], RBX [29], and others) but most of them are closed-source and cannot simulate or fit the spectra obtained with particle channeling in consideration. There are several tools dedicated to simulating the RBS in the case of channeling, such as FLUX7 [11], McChasy2 [30],

ScatGUI [31], RBSADEC [32], DICADA [33], and others. However, most of them are closed source, and the open source ones are mostly outdated, and thus not freely modifiable. To solve this problem, a new open-sourced model was developed during this work to simulate the backscattering spectra both in amorphous and crystalline materials. The initial model was designed for amorphous materials but was later extended to include crystalline materials. The open-source GEANT4 [34] simulation toolkit was chosen as the backbone for these models as it is continuously developed and improved by specialists in various fields. With the model being based on the versatile GEANT4 toolkit, it is possible to freely modify physics processes, utilize different and updated particle stopping powers, add experimental backscattering cross-sections and/or corrections to the theoretical ones, etc. The current model is a proof of concept validated against the experimental proton-induced RBS spectra from single virgin crystals and further development of the model will allow the simulation of crystals with defects.

Aim and tasks

This work aimed to create a particle backscattering spectra simulation model that is capable of simulating the spectra of channeled particles. To do this several specific tasks were set:

1. Create a large angle backscattering spectra simulation model for amorphous materials, and check validity against the experimental data and other commercial tools.
2. Check the validity of the original particle channeling model in GEANT4, make necessary changes to the model, and validate it against the experimental data.
3. Create a large angle backscattering spectra simulation model that is capable of simulating particle channeling spectra and validate it against the experimental data.

Novelty

During the course of this work, 2 new open-source models were created for simulation of the backscattering spectra: the first one designed for amorphous materials and the second one for crystalline materials taking into

account particle channeling. Amorphous model was validated against the experimental spectra induced by protons, helium, and lithium ions, as well as compared with the results of the most popular commercial tools for simulation and fitting of backscattering spectra.

During initial validation of the original particle channeling model, several shortcomings were found, notably the incorrect energy loss evaluation of channeled particles and the disregard for critical channeling angle. The model was then modified and became suitable to obtain the energy loss of channeled 1 – 20 MeV protons and deuterons.

The newly developed particle channeling backscattering spectra simulation model was validated against the experimental spectra and proved to be able to simulate the spectra with good accuracy. This work presents the dependency of the backscattering spectra on the sample temperature, as well as several particle beam spread angles. The final model can provide the initial spectrum before the experimental acquisition or during the analysis of the acquired spectra.

Statements

1. The utilization of lithium stopping power libraries, primarily tailored to match the experimental conditions, facilitates the determination of HfO₂/SiO₂ sample layer distribution with deviations of less than 10 % when simulating backscattering spectra.
2. An increase of sample temperature, not associated with the effects of imping particles, leads to an increase in energy loss and a decrease in channeling efficiency. For instance, raising the temperature of a silicon sample from 100 K to 1000 K reduces the yield of high-energy protons incident along the <100> axis by approximately a factor of 2.
3. The original GEANT4 particle channeling model incorrectly estimates the energy loss of particles, while the modified particle channeling model enables the evaluation of energy loss for channeled protons and deuterons with a deviation of less than 20 % from experimental results in the energy interval 1 – 20 MeV in silicon, germanium, and gallium arsenide crystals.
4. The particle backscattering spectra in channeling conditions are mostly influenced by the sample temperature and the beam spread; however, the

acquisition of spectra at temperatures below 300 K is purposeful only when good beam collimation is ensured. For protons with energy lower than 3 MeV, the beam spread must not exceed 0.1° .

Structure of summary

During the work presented here, three simulation models were created or modified. Consequently, the structure of this summary is also divided into three separate parts. Each of these three parts is based on published papers, therefore readers are advised to look up the corresponding references for more details.

The first part describes backscattering spectra simulation model made for the amorphous materials. It introduces the reader to the main methodology used in creation of the model. This part is finished with results of the model as well as a comparison with other tools and experimental data.

The second part of this summary shows the shortcomings of the original particle channeling model and describes modifications made to the model. The result section shows validation of channeled proton and deuteron stopping powers in silicon, germanium, and gallium arsenide crystals.

The third part of this summary describes the model of channeling backscattering spectra simulation, defines limitations of the model, and shows the influence of temperature and angular beam spread on spectra. The result section shows a comparison between the experimental and the simulated backscattering spectra, obtained in particle channeling conditions.

The summary is finished with conclusions and a reference list.

Part I. Backscattering spectra simulation model for amorphous materials.

This part is based on the publication:

D. Lingis, M. Gaspariūnas, V. Kovalevskij, A. Plukis, V. Remeikis, „A model to simulate large angle Rutherford backscattering spectra in GEANT4”, *Computer Physics Communications* Vol. 271, (2022), <https://doi:10.1016/j.cpc.2021.108187>.

Methodology

The model is based on the GEANT4 simulation toolkit [34] which is a widely used open-source C++ tool for the simulation of particle passage through matter. GEANT4 was chosen as it is possible to add physics processes as well as calculation algorithms according to the user's needs. The particle passage is simulated as a track that consists of steps where physics processes are invoked to calculate the kinetic energy, momentum, and the next position of the particle. At such steps, the backscattering model gets the information for the evaluation of the backscattering spectra: particle kinetic energy, momentum, depth in sample, material, and others. The backscattering spectra simulation model utilizes the differential *Rutherford* backscattering cross-section to evaluate the backscattering yield. Pure differential *Rutherford* backscattering cross-section is evaluated for each incident ion-target atom pair. The theoretical differential cross-section often deviates from the experimental one and corrections must be applied. The low energy deviation is caused by the shielding of the electron cloud surrounding the nuclei and is taken into account by the *Andersen* shielding factor [55]. In case of a high energy regime (> 0.5 MeV), the deviation of the theoretical *Rutherford* cross-section from the experimental one comes from the influence of nuclear forces between the projectile-target nuclei, and this deviation was accounted for as the ratio of non-*Rutherford* cross section to the *Rutherford* cross section (RTR). RTR values (sometimes called “recommended” cross-section values) were taken from the *SigmaCalc2.0* calculator [47], [64]. The yield of backscattering from a thin layer is then evaluated by multiplying the differential backscattering cross-section, detector solid angle, thickness of the thin layer, and atom density of the specific element.

GEANT4 stopping powers were compared to SRIM stopping powers. SRIM–2013 (The Stopping and Range of Ions in Matter) [37] is an industry-standard code for the simulation of particle transport in amorphous materials. Code utilizes binary collision approximation to treat the interactions between impinging particles and target atoms. The main advantage of SRIM code is its ability to evaluate the interaction of almost any ion–atom pair in the wide energy interval. It is also a universal tool for obtaining and comparing stopping powers. During the course of this research, SRIM was used to evaluate the energy loss in amorphous materials and to obtain the stopping powers used in GEANT4 and FLUX7 codes.

To check the validity of GEANT4 simulations, comparisons were made with 2 popular backscattering spectra simulation and fitting tools. SIMNRA [26] and DataFurnace WiNDF [25] are two of the most popular applications used in the IBA field for the simulation and analysis of backscattering spectra. These tools are widely used because of their universality – it is possible not only to simulate and fit the RBS spectra but also work with other spectra, such as PIXE, ERD, NRA, and others. The tools were set to use SRIM–2003 stopping powers, *Bohr* energy loss straggling with *Chu* correction, and SigmaCalc resonant (non-*Rutherford*) cross sections [39]. Both applications used multiple scattering whereas double scattering was also enabled in WiNDF. Geometry of experiments (beam energy, incident angle, distance to the detector, etc.) was the same in both tools. Commercial tools were used for comparison with GEANT4 RBS spectra simulation model.

Experimental

During the course of this work, experimental measurements of backscattering spectra were performed only for the amorphous materials. Other experimental results were either digitized or taken from the corresponding sources and will not be described here. Analysis conditions for amorphous material study are summarized in Table 1. As material density can change between methods, thin film units (TFU, 1 TFU = 10^{15} at/cm²) were used to provide the layer thicknesses of each sample. Experimental measurements of proton and lithium ion-induced backscattering spectra of amorphous materials were performed by using MV Tandetron 4110A (General Ionex Corporation, USA) ion beam accelerator, located at the Center for Physical Sciences and Technology, Vilnius,

Lithuania. Spectra were acquired with an AMETEK-ORTEC ruggedized partially depleted silicon detector with 15 keV FWHM energy resolution for 5.5 MeV alpha particles. The incident beam was normal to the surface and the detection angle was 135°. Experimental data for the He beam were taken from [88], where the 2 MV Tandem accelerator energy calibration procedure is explained in detail. ULTRA™ Alpha (Ametek-Ortec, USA) detector was used in the University of Surrey Ion Beam Center, England, at a 173.4° backscattering angle to collect the data.

Table 1. Sample and beam information

Sample	Incident beam	Energy, MeV	Collected charge, μC	Layer #	Composition	Thickness, TFU
FS (Fused silica) substrate	Protons	1.6	3.7	1	SiO ₂	Substrate
HfO ₂ /FS SiO ₂	Protons	2.0	0.7	1	0.936 HfO ₂ + 0.064 SiO ₂	1470
				2	SiO ₂	Substrate
	Li ²⁺	3.0	0.8	1	0.936 HfO ₂ + 0.064 SiO ₂	1470
				2	SiO ₂	Substrate
SiO ₂ /Nb ₂ O ₅ /FS SiO ₂	Protons	1.5	2.6	1	SiO ₂	1930
				2	Nb ₂ O ₅	1580
				3	SiO ₂	substrate
Au/Ni/SiO ₂ /Si	He ⁺	3.06	1.9	1	Au	14
				2	0.92 Ni + 0.08 Cu	50
				3	SiO ₂	2000
				4	Si	Substrate

Results and discussion

Before simulating backscattering spectra, a comparison between GEANT4 and SRIM-2013 stopping powers was made for energies up to 3 MeV. For light ions, GEANT4 uses PSTAR (protons) and ASTAR (alpha particles) stopping power libraries [65]. The comparison of stopping powers for protons in silicon dioxide showed the biggest deviation of 10 % for 30 keV protons, while the average difference between all stopping powers was 4.5 %. For alpha particles in silicon dioxide, the biggest difference was 14 % for 150 keV alphas, while the overall average difference was 9 %. Comprehensive analysis and comparison of experimental stopping power

libraries have shown, that a difference of up to 20 % is expected [68], [69], thus the difference obtained from GEANT4 simulations is acceptable. In the case of heavier ions, GEANT4 uses ICRU Report73 stopping powers [70]. The GEANT4 model was also modified to use SRIM stopping powers. The comparison between ICRU and SRIM stopping powers in HfO₂ for lithium ions has shown a difference of up to 60 %. This difference is significant when simulating backscattering spectra and will be discussed in greater detail when the lithium ion backscattering spectrum is described.

The developed backscattering spectra simulation model was first validated against the SigmaCalc [39] cross-sections for oxygen and silicon atoms in the cases of backscattering at 135° and 160°. The cross-sections were evaluated for alpha particles and protons. Agreement of cross-section evaluated by GEANT4 and SigmaCalc was better than 0.4 % and deviations occurred in the regions where sharp increases and decreases of cross-section occurred – in the so-called resonant peaks. This shows that the cross-section evaluation algorithm was correctly implemented in GEANT4 and this model can accurately calculate the cross-section.

The comparison between GEANT4 and experimental spectra induced by 1.9 MeV – 3.47 MeV protons in a pure silicon sample has revealed a satisfactory agreement in terms of energy positions and the overall shape of the spectra. However, as particle energy increases, the simulated spectra tend to gradually deviate from the experimental measurements, particularly in the case of silicon. This discrepancy arises due to the inherent limitations in accuracy of the SigmaCalc cross-sections.

Simulations of thin layers (< 10 nm) of materials have revealed that for the model to accurately replicate proton backscattering from such layers, the utilization of a step limiter is imperative, accompanied by a specific maximum step length. Employing this step limiter forces GEANT4 to activate the physics process once the particle has traversed the predetermined distance. In the case of the 5 nm layer of Hf₂O₅ within the SiO₂ sample, the emergence of Hf and O peaks was only evident when step size was decreased significantly. Notably, in this specific instance, the step length of 0.5 nm yielded the most optimal modelled spectra. This suggests that for thin layers, the step length of the particles must be lower by a factor of at least 10 than the thickness of the layer in order to correctly simulate backscattering spectra in the context of thin layers.

Comparisons between experimental and simulated backscattering spectra were performed for 1.6 MeV protons in SiO₂ and 1.5 MeV protons in

SiO₂/Nb₂O₅/FS SiO₂ samples. In case of pure SiO₂ sample, GEANT4 yielded an excellent fit to the experimental curve, with peak energy positions in perfect agreement. In case of Nb₂O₅ optical coating, similar agreement was observed with main numerically simulated peaks of Nb, Si, and O closely corresponding to the experimental spectrum.

He⁺ ions of 3.06 MeV were used for the analysis of the Au/Ni/SiO₂/Si sample. The comparison between experimental and simulated spectra has revealed that GEANT4 is able to accurately simulate the backscattering spectrum with main peaks of O, Ni and Au closely matching the experimental spectrum.

Final comparison of experimental and simulated spectra was performed with 2.0 MeV protons and 3.0 MeV Li²⁺ ions incident on the HfO₂/FS SiO₂ sample. As was the case with previous instances, the GEANT4 simulated proton spectrum closely aligns with the experimental spectrum. Regarding lithium ions, several noteworthy observations emerged. For lower energy portion of the spectra, a significant mismatch between the experimental and simulated curves was observed. The oxygen and silicon edges were smoother in the experimental spectrum, while the GEANT4 simulated spectrum displayed rather steep increases of intensity. Simulation utilizing the WiNDF tool with double scattering enabled provided a better match to the experimental spectrum. The GEANT4 backscattering model lacks this feature, indicating that deviations from the experimental spectra can be anticipated in the context of heavy ions in the low-energy region of the backscattering spectra. The second observation made was regarding the stopping power libraries. Under the same conditions, when using ICRU stopping power libraries, the low energy silicon edge shifts by approximately 100 keV toward lower energies, compared to experimental spectrum. The stopping power for HfO₂ obtained from the ICRU library is 50 % higher than the SRIM library's stopping power. With the use of ICRU stopping powers, the simulation indicates a HfO₂ layer thickness of 1320 TFU, while SRIM stopping powers suggest a thickness of 1470 TFU. This part leads to the first statement of the dissertation:

1. The utilization of lithium stopping power libraries, primarily tailored to match the experimental conditions, facilitates the determination of HfO₂/SiO₂ sample layer distribution with deviations of less than 10 % when simulating backscattering spectra.

Part II. Particle channeling model in GEANT4.

This part is based on the publication:

D. Lingis, M. Gaspariūnas, A. Plukis, V. Remeikis, “Improvements and validation of particle channeling model in GEANT4”, Nucl. Instruments Methods Phys. Res Sect. B Beam Interact. with Mater. Atoms, Vol. 525, p. 1–12, (2022), <https://doi:10.1016/j.nimb.2022.05.007>.

Methodology

Particle channeling model in GEANT4 was first implemented with version 10.3 of the toolkit with addition of crystalline structure class [17]. Model was designed for the simulation of 400 GeV/c energy protons channeling in straight and bent crystals. The model introduced crystal materials, channeling process, and physics process wrapper classes to the toolkit. The first one allows crystalline materials to be simulated while the channeling process solves equations of motion in channeling geometry. The wrapper classes resize the interaction length of both discrete and continuous processes according to the normalized density of electrons and nuclei at the current position (step) of the particle. With 10.6 version of the toolkit instead of wrapper classes, cross-section bias operations were used to incorrectly evaluate the energy loss of channeled particles. During this research, the model was modified to use wrapper classes for the correct evaluation of energy loss. The nuclei and electron densities as well as crystal potential and electric field components are obtained from ECHARM [91] evaluated distributions. The ECHARM calculation method relies on the classical physics equations and the Fourier expansion of periodic functions in a periodic structure (see [91] for more details). Crystal characteristics were evaluated for Si, GaAs, and Si. Silicon characteristics were obtained along the $\langle 001 \rangle$, $\langle 110 \rangle$, and $\langle 111 \rangle$ axes with temperatures ranging from 100 K to 1400 K. Furthermore, two Debye temperatures were used for the simulations: 640 K (obtained from the heat capacity measurements [92]) and 490 K (obtained from the channeling experiments [93]). For Ge and GaAs simulations, data files were generated for 300 K and 800 K temperatures along $\langle 110 \rangle$ and $\langle 111 \rangle$ axes. The Debye temperatures at room temperature were chosen as follows [94]: 400 K for Ge, 240 K for Ga, and 275 K for As. Lattice constants used in evaluations were 5.431 Å for Si, 5.6575 Å for Ge,

and 5.653 Å for GaAs. The mean squared thermal vibrational amplitude for specific temperature is obtained by [95]:

$$\langle A^2(t) \rangle = \frac{9h^2T(\varphi(x) + \frac{x}{4})}{4\pi^2MkT_D^2}, x = \frac{T_D}{T}, \quad (34)$$

where h is Planck's constant, k is the Boltzmann constant, T is the investigated temperature, M is mean atomic mass, $x = T_D/T$ is the ratio of Debye temperature to the investigated temperature, and $\varphi(x)$ is the Debye integral:

$$\varphi(x) = \frac{1}{x} \int_0^x \frac{tdt}{e^t - 1}. \quad (35)$$

Another modification to channeling model was the inclusion of a critical channeling angle condition, which was not taken into account in the original model. The critical channeling angle represents the maximum angle a particle can achieve with the string of atoms before dechanneling occurs. The model now checks whether the angle between particle momentum and string of atoms is lower than the critical channeling angle to simulate particle channeling.

The validation of modified GEANT4 channeling model was performed against experimental and simulation results, obtained with the FLUX7 simulation tool [11]. FLUX7 is a collection of applications to simulate particle tracks in channeling conditions. The algorithm is based on the Monte Carlo binary collision approximation and instead of continuous crystal potential a lattice with correct atom positions is simulated. The interaction was treated with a screened Coulomb potential and the Hartree-Fock screening function was used, as it provided the best agreement with experimental results [90]. Energy loss was simulated based on two setups – with and without the influence of valence electrons. When valence electrons were considered, SRIM–2013 stopping powers were used to calibrate the energy loss.

Results and discussion

A. Temperature effects on particle channeling

The first half of this section deals with temperature effects on the crystal potential distribution and the mean thermal vibrational amplitudes. Temperature dependence was evaluated for silicon lattice in the range of 100 K to 1400 K. Mean thermal vibrational amplitudes evaluated at 490 K and 640 K *Debye* temperatures differs by about 18 % at 100 K temperature and up to 27 % at 1400 K temperature. In the investigated temperature range, thermal vibrational amplitude increases by a factor of 2.75 for $T_d = 640$ K and by a factor of 3.01 for $T_d = 490$ K. These results coincide well with values obtained by other authors [95]. The maximum value of crystal potential along the $\langle 100 \rangle$ axis of silicon decreases from 95 eV at 100 K to 44 eV at 1000 K for $T_d = 490$ K, while in the case of $T_d = 640$ K, the decrease is from 106 eV to 57 eV. In both cases, the decrease of maximum potential value is approximately by a factor of two.

The second half of this part deals with the energy loss of channeled particles. Simulations using the original channeling code (10.6 version) have demonstrated that 2 MeV protons lose energy the same way as if they were travelling through an amorphous material, even though channeling along the $\langle 100 \rangle$ and $\langle 110 \rangle$ axis of silicon was simulated. Results obtained with the modified model show a decrease of energy loss with high-intensity peaks of high-energy channeled particles.

Channeling efficiency (fraction of channeled particles to total transmitted particles) dependence on the temperature of sample has shown that for 0.1° sample rotation and 2 MeV protons incident along the $\langle 100 \rangle$ axis of silicon, efficiency decreases from 22 % at 100 K to 12 % at 1000 K. When 1 MeV parallel protons were simulated along the $\langle 100 \rangle$ axis of silicon at 100 K and 1400 K, the peak energy of transmitted protons was around 0.88 MeV for both temperatures. However, the intensity of the high energy peak decreased from 22 % at 100 K to 18 % at 1400 K, almost halving in magnitude. When the number of transmitted protons with energy of 0.88 MeV is compared between simulations at 100 K and 1400 K, the parallel beam simulation indicates a 12 % higher intensity at 100 K. In the case of 0.4° beam incidence angle, the ratio increases significantly to a factor of 13.9. This angle is near the critical channeling angle at 1400 K. This shows that with an increasing sample temperature, the thermal vibrations of atoms also increase.

As a result, this leads to a decrease in the maximum crystal axial/planar potential, as well as a decrease in channeling efficiency. This leads to the second statement of this dissertation:

2. The increase of sample temperature, not associated with the effect of impinging particles, determines an increase of energy loss and a decrease of channeling efficiency – increasing the temperature of a silicon sample from 100 K to 1000 K decreases the yield of high-energy protons incident along the $\langle 100 \rangle$ axis approximately by a factor of 2.

B. Energy loss of channeled particles

Validation of energy loss using the modified GEANT4 channeling model was conducted for protons and deuterons ranging from 1 MeV to 20 MeV, channeled within silicon, germanium, and gallium arsenide crystals. In the case of 20.4 MeV protons, incident along the $\langle 111 \rangle$ axis of 240 μm thick silicon sample, the experimental data indicates an energy loss of 1.3 MeV in the amorphous case [100], while the simulation yielded a value of 1.24 MeV. For channeled particles, the experimental loss was 0.83 MeV, while the simulations resulted in energy loss values of 0.83 MeV (for 0.02° angular beam spread) and 0.77 MeV (for 0.01° angular beam spread). The experimental ratio of energy loss of channeled particles to amorphous material energy loss was $K = 0.64 \pm 0.1$, while the simulated ratio was equal to 0.66 (for a 0.02° spread) and 0.62 (for a 0.01° spread) which aligns well with the experimental value. Another energy loss comparison was conducted for protons ranging from 1 to 10 MeV, incident along the $\langle 111 \rangle$ axis of silicon. The average deviation of GEANT4 values from the corresponding experimental values fell within the range of 7 %, while the maximum difference of 30 % was observed for 1 MeV protons.

The comparison between experimental data and simulations was extended to encompass protons and deuterons channeled along the $\langle 110 \rangle$ and $\langle 111 \rangle$ axes of Ge and GaAs crystals. Amorphous energy losses were also calculated using SRIM to determine the disparities in stopping powers between GEANT4 and SRIM. The largest deviation observed was approximately 15 %, while the average deviation of stopping powers ranged from 3 % to 4 %. In the context of channeling in Ge crystals, simulated energy losses and effective stopping numbers of protons and deuterons exhibit a strong alignment with the experimental results (deviations being under 10 %) for incident energies exceeding 6 MeV. For energies below 6

MeV, the deviation increases, reaching between 10 % and 20 %. The average difference between results stands at 7.3 % for channeling along the $\langle 110 \rangle$ axis and 6.2 % for channeling along the $\langle 111 \rangle$ axis in germanium crystals.

Regarding energy loss in GaAs crystals, the deviation of simulated values from experimental results remains below 10 % in nearly all instances. Higher deviations from experimental result are evident for low-incident energy deuterons (4.81 MeV and 4.34 MeV) channeled along the $\langle 110 \rangle$ axis of GaAs. The observed difference of 10 % to 20 % might be attributed to variations in stopping powers within the low-energy range. Nevertheless, when considering all energies and ions, the average difference in effective stopping numbers between simulations and experiments approximates 6.2 % for channeling along the $\langle 110 \rangle$ axis and 4.3 % for channeling along the $\langle 111 \rangle$ axis of GaAs crystals.

This section leads to the third statement of this dissertation:

3. The original GEANT4 particle channeling model incorrectly evaluates the energy loss of particles, whereas the modified particle channeling model allows the evaluation of the channeled proton and deuteron energy loss with a deviation of less than 20 % from the experimental results in the energy interval 1 – 20 MeV in silicon, germanium, and gallium arsenide crystals.

Part III. Model for the simulation of backscattering spectra of channeled particles.

This part is based on the publication:

D. Lingis, M. Gaspariūnas, V. Kovalevskij, A. Plukis, V. Remeikis, „Simulation of large angle Rutherford backscattering spectra of channeled protons in GEANT4“, Nucl. Instruments Methods Phys. Res Sect. B Beam Interact. with Mater. Atoms., Vol. 543, 165091, <https://doi.org/10.1016/j.nimb.2023.165091>

Methodology

Channeling backscattering spectra simulation model was developed by combining the amorphous backscattering model with the modified particle channeling model. Particle channeling model was left unchanged and modifications were only made to the backscattering model. As backscattering is a large-angle scattering event, the correlation between the collisions is lost and dechanneling occurs. Major crystallographic axes ($\langle 100 \rangle$, $\langle 110 \rangle$ and $\langle 111 \rangle$) of cubic crystals are shifted by 45° intervals, therefore the channeling process can be rejected for scattering events at $135^\circ < \varphi < 180^\circ$ angles. Therefore, the interaction of backscattered particles with the material is treated as if the material was amorphous.

Backscattering cross-section, energy loss, and energy loss straggling are evaluated in the same way as it was done with the amorphous materials backscattering model. For channeling simulations, an additional modifier of normalized nuclei density is applied to the backscattering yield equation. It was taken from ECHARM density distribution at the current position of the particle. As nuclei densities are localized on the string of atoms, backscattering yield of channeled particles increases as particles approach atoms and decreases in the centers of the channels.

Channeling backscattering spectra were simulated for pure silicon, silicon dioxide, silicon carbide, and diamond crystals. Before channeling simulations, crystal characteristics were evaluated using the ECHARM code. Materials' characteristics were obtained by using *Moliere* form factors as they are most commonly used to describe ion-atom interactions in channeling simulations [106]. Experimentally determined channeling and random orientation spectra for various materials were digitized from

references [107]–[112] by using a freely available WebPlotDigitizer v4.6 application [113].

Results and Discussion

A. The influence of beam spread and temperature on backscattering spectra

Before comparing the simulated and experimental spectra, the impact of angular beam spread on the backscattering spectra was assessed. Simulations were performed for 2 MeV protons incident on the $\langle 100 \rangle$ axis of silicon, employing angular beam spread within the range of 0° to 0.6° . The lattice temperature was set to 300 K and the Debye temperature of 640 K was used. In this case, the critical channeling angle was determined to be 0.43° .

When comparing parallel beam channeling and amorphous backscattering spectra, the parallel beam-induced spectrum had a maximum intensity of 20 % compared to the amorphous peak value. An overall spectrum shows a linear increase of intensity until the resonant peak location (~ 1 MeV) and a linear decrease of intensity afterward. The shape of the peak bore no resemblance to that of an amorphous peak. When a 0.1° beam was simulated, the maximum intensity of the spectrum reached 47 % of the amorphous spectrum maximum value. With further increase of angular spread, the intensity of the overall channeling spectrum increases, and the shape of the resonant peak starts to resemble the amorphous resonant peak shape. Based on the channeling process, particles that are channeling lose significantly less energy when compared to amorphous materials. This would imply that the resonant peak would be observed for significantly lower backscattered particle energies. However, only a 50 keV shift to lower energies was observed, which suggests that particles lost energies somewhat similarly to amorphous materials. This indicates that the backscattering spectra are primarily caused by particles that dechannel relatively fast or were not channeling in the first place.

Another comparison was made with angular beam spread and temperature increases taken into consideration. Spectra were simulated with lattice temperatures ranging from 100 K to 1400 K for a parallel beam and a beam with 0.1° angular spread. In both cases the influence of temperature increase is observed for the overall intensity of the spectra, however, the shape of the spectra did not change significantly. For the parallel beam, the intensity of the resonant peak at 100 K was 65 % of the maximum intensity

at 1400 K. When 0.1° beam spread is considered, the maximum intensity of the resonant peak reached 75 % of the maximum intensity at 1400 K. This means that the intensity of the resonant peaks increased by 35 % for completely parallel beam and by 25 % for a beam with 0.1° angular spread when comparing 100 K and 1400 K simulations. The overall shape of the curves does not change much with the increase in temperature – the main difference was the more defined shape of the resonant peak and increased overall intensity.

This leads to the 4th statement of this dissertation:

4. The particle backscattering spectra in channeling conditions are mostly influenced by the sample temperature and the beam spread; however, the acquisition of spectra at temperatures below 300 K is purposeful only when good beam collimation is ensured. For protons with energy lower than 3 MeV, the beam spread must not exceed 0.1° .

B. Comparison of simulated and experimental backscattering spectra

A comparison between simulated and experimental backscattering spectra was performed for pure silicon samples when particles channel along the $\langle 100 \rangle$, $\langle 110 \rangle$ and $\langle 111 \rangle$ axes. Simulated random orientation spectra (amorphous case) agree well with the experimental spectra, however, several differences were observed. Although the overall shape and intensity follow the experimental curves, the simulated spectra are sharper and have higher intensity resonant peaks. When proton energy exceeds 2 MeV, the differences are more pronounced, as was also observed in the amorphous model results for the silicon sample (see part I of this summary).

When channeling spectra are considered, the agreement between the simulated and the experimental spectra is similar with main differences occurring in the areas of resonant peaks. In most cases, the simulated spectra match the experimental measurements only when angular beam spread is considered. This strongly suggests that angular beam spread was present in most experiments.

Almost all simulated scenarios exhibit a higher intensity in the spectral region following the resonant peak. This region corresponds to the sharp decrease in backscattering cross-section. As backscattering spectra are primarily caused by the dechanneled particles, the sustained intensity without the decrease indicates that a smaller fraction of particles dechannel

during the simulations compared to the experimental conditions. In the case of channeling spectra when particles channel along the $\langle 100 \rangle$ axis of silicon, simulations were performed with 300 K and 1200 K lattice temperatures to check the influence of temperature on the backscattering spectra. Both cases show similar curves with the higher temperature curve having a higher intensity on the high energy side of the spectra (before the resonant peak) and lower intensity on the low energy side. Thus, no significant influence of temperature increase was observed in simulations.

A comparison between experimental and simulated spectra resulting from proton interactions with SiC and SiO₂ crystals also showed a good agreement. Simulated spectra for random crystal orientations align almost perfectly with the experimental spectra. When particle channeling is taken into account, the agreement between experimental and simulated spectra parallels that of the pure silicon cases – most disparities are observed in regions following the resonant peaks.

The simulated and experimental backscattering spectra from diamond crystal, obtained when protons were channeling, are perfectly aligned for incident energies where no resonant cross-sections are present. However, as proton energy increases, deviations in the simulated spectra become apparent in the regions following the resonant peaks.

In conclusion, the channeling backscattering spectra simulation model effectively reproduces the spectra with sufficient accuracy. Because it is not a spectra fitting, but a spectra simulation tool, the changes in simulation conditions (beam energy, lattice imperfections, beam spread, scattering geometry, etc.) can result in significantly different simulated spectra. Moreover, the accuracy of stopping powers and resonant cross-sections sets the boundary on the achievable precision of the simulations. With these factors taken into consideration, the model provides good accuracy. To achieve a better alignment with experimental spectra, further development of the model is necessary.

Conclusions

1. When conducting simulations for ion-induced backscattering spectra, it is essential to employ the most suitable stopping power libraries, which correspond to the experimental conditions. For lithium ions, nearly identical HfO₂ spectra are generated with 1320 TFU (thin film units) layer using ICRU stopping powers, as well as 1470 TFU layer with SRIM stopping powers. The optimal outcome is achieved by utilizing the SRIM stopping powers.
2. The increase of silicon sample temperature from 100 K to 1000 K decreases the maximum value of crystal potential nearly twofold – from 106 eV to 57 eV, and the fraction of high energy channeled particles in the case of 0.1° sample rotation decreases by almost a factor of 2 as well – from 22 % to 12 %. This shows that the increase in sample temperature leads to lower a fraction of high-energy particles in channeling experiments.
3. The modified channeling model allows evaluation of channeled proton and deuteron energy loss with better than 20 % deviation from the experimental values in the energy range 1 – 20 MeV in silicon, germanium, and gallium arsenide crystals. The average deviation is less than 10 % and deviation increases with decreasing particle energy due to differences in stopping powers.
4. When comparing 2 MeV proton-induced backscattering spectra, the temperature increase from 100 K to 1400 K increases the spectra intensity by 40 % and 25 % for parallel particle beam and beam with a 0.1° angular spread, respectively. When the same temperature is used, the parallel and 0.1° angular spread beam-induced spectra differ not only by the shape, but the overall intensity increases more than 2 times when beam spread is used. This shows that the increase in angular beam spread induces more significant changes to the spectra than the increase in sample temperature.

LITERATŪROS SĄRAŠAS

- [1] E. Lagzdina *et al.*, “Structural investigation of RBMK nuclear graphite modified by $^{12}\text{C}^+$ ion implantation and thermal treatment,” *Nucl. Instruments Methods Phys. Res. Sect. B Beam Interact. with Mater. Atoms*, vol. 444, pp. 23–32, Apr. 2019, doi: 10.1016/J.NIMB.2019.01.049.
- [2] R. G. Wilson, Wilson, and R. G., “Ion implantation and SIMS profiling of impurities in II-VI materials (HgCdTe and CdTe),” *JCrGr*, vol. 86, no. 1–4, pp. 735–743, Jan. 1988, doi: 10.1016/0022-0248(90)90800-Z.
- [3] N. Sousbie, L. Capello, J. Eymery, F. Rieutord, and C. Lagahe, “X-ray scattering study of hydrogen implantation in silicon,” *J. Appl. Phys.*, vol. 99, no. 10, May 2006, doi: 10.1063/1.2198928.
- [4] L. C. Feldman, J. W. Mayer, and S. T. Picraux, *Materials analysis by ion channeling : submicron crystallography*. Academic Press, 1982.
- [5] V. S. Drumm *et al.*, “Lattice location of nickel in diamond by RBS channelling and PIXE,” *Phys. Status Solidi Appl. Mater. Sci.*, vol. 208, no. 1, pp. 42–46, Jan. 2011, doi: 10.1002/PSSA.201026118.
- [6] M. Wang *et al.*, “Breaking the Doping Limit in Silicon by Deep Impurities,” *Phys. Rev. Appl.*, vol. 11, no. 5, p. 054039, May 2019, doi: 10.1103/PhysRevApplied.11.054039.
- [7] J. Lindhard, “Motion of swift charged particles, as influenced by strings of atoms in crystals,” *Phys. Lett.*, vol. 12, no. 2, pp. 126–128, Sep. 1964, doi: 10.1016/0031-9163(64)91133-3.
- [8] B. R. Appleton, C. Erginsoy, and W. M. Gibson, “Channeling effects in the energy loss of 3-11-MeV protons in silicon and germanium single crystals,” *Phys. Rev.*, vol. 161, no. 2, pp. 330–349, Sep. 1967, doi: 10.1103/PhysRev.161.330.
- [9] G. Della Mea, A. V. Drigo, S. Lo Russo, P. Mazzoldi, and G. G. Bentini, “Energy Loss of H, D, and ^4He Ions Channeled Through Thin single Crystals of Silicon,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 27, no. 18, p. 1194, Nov. 1971, doi: 10.1103/PhysRevLett.27.1194.
- [10] S. Shafiei and M. Lamehi-Rachti, “The study of channeling parameters of protons along axial and planar directions of Si,” *Nucl. Instruments Methods Phys. Res. Sect. B Beam Interact. with Mater. Atoms*, vol. 515, pp. 7–13, Mar. 2022, doi: 10.1016/J.NIMB.2022.01.005.
- [11] P. J. M. Smulders and D. O. Boerma, “Computer simulation of channeling in single crystals,” *Nucl. Inst. Methods Phys. Res. B*, vol. 29, no. 3, pp. 471–489, Dec. 1987, doi: 10.1016/0168-583X(87)90058-9.
- [12] T. Venkatesan, B. S. Elman, G. Braunstein, M. S. Dresselhaus, and G. Dresselhaus, “Ion channeling studies of regrowth kinetics of

- disordered surface layers on graphite,” *J. Appl. Phys.*, vol. 56, no. 11, pp. 3232–3240, Dec. 1984, doi: 10.1063/1.333842.
- [13] A. Turos, P. Jóźwik, M. Wójcik, J. Gaca, R. Ratajczak, and A. Stonert, “Mechanism of damage buildup in ion bombarded ZnO,” *Acta Mater.*, vol. 134, no. June, pp. 249–256, 2017, doi: 10.1016/j.actamat.2017.06.005.
- [14] A. Turos, P. Jozwik, L. Nowicki, and N. Sathish, “Ion channeling study of defects in compound crystals using Monte Carlo simulations,” *Nucl. Instruments Methods Phys. Res. Sect. B Beam Interact. with Mater. Atoms*, vol. 332, pp. 50–55, 2014, doi: 10.1016/j.nimb.2014.02.028.
- [15] G. Lulli, E. Albertazzi, M. Bianconi, and S. Balboni, “Computer simulation of ion channeling in Si containing structurally relaxed point defects,” *Nucl. Instruments Methods Phys. Res. Sect. B Beam Interact. with Mater. Atoms*, vol. 211, no. 1, pp. 50–54, 2003, doi: 10.1016/S0168-583X(03)01184-4.
- [16] S. P. Ahlen, “Theoretical and experimental aspects of the energy loss of relativistic heavily ionizing particles,” *Rev. Mod. Phys.*, vol. 52, no. 1, p. 121, Jan. 1980, doi: 10.1103/RevModPhys.52.121.
- [17] P. Gehrman, K. Lenkeit, and R. Stolle, “Measurements of Proton Channeling Energy Losses in Silicon in the Intermediate Energy Region,” *Phys. status solidi*, vol. 131, no. 2, pp. 519–526, Oct. 1985, doi: 10.1002/pssb.2221310213.
- [18] E. Kührt and R. Wedell, “Energy losses in crystalline and amorphous solids in the intermediate energy region,” *Phys. status solidi*, vol. 116, no. 2, pp. 585–595, Apr. 1983, doi: 10.1002/PSSB.2221160220.
- [19] R. Hellborg, “The Energy Loss of Channeled Protons Determined in an Indirect Way,” *Phys. Scr.*, vol. 4, no. 1–2, p. 75, Jul. 1971, doi: 10.1088/0031-8949/4/1-2/015.
- [20] A. V. Krasheninnikov and K. Nordlund, “Ion and electron irradiation-induced effects in nanostructured materials,” *J. Appl. Phys.*, vol. 107, no. 7, p. 071301, Apr. 2010, doi: 10.1063/1.3318261.
- [21] S. Ghaderzadeh, M. Ghorbani-Asl, S. Kretschmer, G. Hlawacek, and A. V. Krasheninnikov, “Channeling effects in gold nanoclusters under He ion irradiation: insights from molecular dynamics simulations,” *Nanotechnology*, vol. 31, no. 3, p. 035302, Oct. 2019, doi: 10.1088/1361-6528/AB4847.
- [22] G. Lulli, E. Albertazzi, M. Bianconi, G. G. Bentini, R. Nipoti, and R. Lotti, “Determination of He electronic energy loss in crystalline Si by Monte-Carlo simulation of Rutherford backscattering–channeling spectra,” *Nucl. Instruments Methods Phys. Res. Sect. B Beam Interact. with Mater. Atoms*, vol. 170, no. 1–2, pp. 1–9, Sep. 2000, doi: 10.1016/S0168-583X(00)00089-6.
- [23] A. Turos, L. Nowicki, A. Stonert, K. Pagowska, J. Jagielski, and A.

- Muecklich, "Monte Carlo simulations of ion channeling in crystals containing extended defects," *Nucl. Instruments Methods Phys. Res. Sect. B Beam Interact. with Mater. Atoms*, vol. 268, no. 11–12, pp. 1718–1722, Jun. 2010, doi: 10.1016/J.NIMB.2010.02.046.
- [24] E. Bagli, M. Asai, D. Brandt, A. Dotti, V. Guidi, and D. H. Wright, "A model for the interaction of high-energy particles in straight and bent crystals implemented in Geant4," *Eur. Phys. J. C*, vol. 74, no. 8, p. 2996, 2014, doi: 10.1140/epjc/s10052-014-2996-y.
- [25] C. Jeynes *et al.*, "Elemental thin film depth profiles by ion beam analysis using simulated annealing - A new tool," *Journal of Physics D: Applied Physics*, vol. 36, no. 7. Institute of Physics Publishing, Apr. 07, 2003, doi: 10.1088/0022-3727/36/7/201.
- [26] M. Mayer, "SIMNRA, a simulation program for the analysis of NRA, RBS and ERDA," in *AIP Conference Proceedings*, Nov. 2008, vol. 475, no. 1, pp. 541–544, doi: 10.1063/1.59188.
- [27] E. Szilágyi and F. Pászti, "Theoretical calculation of the depth resolution of IBA methods," vol. 85, no. 1–4, pp. 616–620, Mar. 1994, doi: 10.1016/0168-583X(94)95893-9.
- [28] L. R. Doolittle, "Algorithms for the rapid simulation of Rutherford backscattering spectra," *Nucl. Instruments Methods Phys. Res. Sect. B Beam Interact. with Mater. Atoms*, vol. 9, no. 3, pp. 344–351, Jun. 1985, doi: 10.1016/0168-583X(85)90762-1.
- [29] E. Kótai, "Computer methods for analysis and simulation of RBS and ERDA spectra," *Nucl. Instruments Methods Phys. Res. Sect. B Beam Interact. with Mater. Atoms*, vol. 85, no. 1–4, pp. 588–596, Mar. 1994, doi: 10.1016/0168-583X(94)95888-2.
- [30] L. Nowicki, J. Jagielski, C. Mieszczyński, K. Skrobas, P. Jóźwik, and O. Dorosh, "McChasy2: New Monte Carlo RBS/C simulation code designed for use with large crystalline structures," *Nucl. Instruments Methods Phys. Res. Sect. B Beam Interact. with Mater. Atoms*, vol. 498, pp. 9–14, Jul. 2021, doi: 10.1016/j.nimb.2021.04.004.
- [31] T. Nishimura and T. Kachi, "Simulation of channeled implantation of magnesium ions in gallium nitride," *Appl. Phys. Express*, vol. 14, no. 11, p. 116502, Oct. 2021, doi: 10.35848/1882-0786/ac2a55.
- [32] X. Jin *et al.*, "New developments in the simulation of Rutherford backscattering spectrometry in channeling mode using arbitrary atom structures," *Model. Simul. Mater. Sci. Eng.*, vol. 28, no. 7, p. 075005, Sep. 2020, doi: 10.1088/1361-651X/ab81a9.
- [33] K. Gärtner, "Modified master equation approach of axial dechanneling in perfect compound crystals," *Nucl. Instruments Methods Phys. Res. Sect. B Beam Interact. with Mater. Atoms*, vol. 227, no. 4, pp. 522–530, Jan. 2005, doi: 10.1016/j.nimb.2004.10.087.
- [34] S. Agostinelli *et al.*, "GEANT4 - A simulation toolkit," *Nucl. Instruments Methods Phys. Res. Sect. A Accel. Spectrometers, Detect.*

- Assoc. Equip.*, vol. 506, no. 3, pp. 250–303, Jul. 2003, doi: 10.1016/S0168-9002(03)01368-8.
- [35] D. Lingis, E. Lagzdina, A. Plukis, R. Plukienė, and V. Remeikis, “Evaluation of the primary displacement damage in the neutron irradiated RBMK-1500 graphite,” *Nucl. Instruments Methods Phys. Res. Sect. B Beam Interact. with Mater. Atoms*, vol. 436, no. May, pp. 9–17, 2018, doi: 10.1016/j.nimb.2018.08.038.
- [36] H. R. Verma., “Rutherford Backscattering Spectroscopy,” in *Atomic and Nuclear Analytical Methods*, Springer Berlin Heidelberg, 2007, pp. 91–141.
- [37] J. A. Davies and G. A. Sims, “The range of Na 24 ions of kiloelectron volt energies in aluminum,” *Can. J. Chem.*, vol. 39, no. 3, pp. 601–610, Mar. 1961, doi: 10.1139/v61-073.
- [38] G. R. Piercy, F. Brown, J. A. Davies, and M. McCargo, “Experimental evidence for the increase of heavy ion ranges by channeling in crystalline structure,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 10, no. 9, pp. 399–400, May 1963, doi: 10.1103/PhysRevLett.10.399.
- [39] M. T. Robinson and O. S. Oen, “The channeling of energetic atoms in crystal lattices,” *Appl. Phys. Lett.*, vol. 2, no. 2, pp. 30–32, Jan. 1963, doi: 10.1063/1.1753757.
- [40] A. F. Elishev *et al.*, “Steering of charged particle trajectories by a bent crystal,” *Phys. Lett. B*, vol. 88, no. 3–4, pp. 387–391, Dec. 1979, doi: 10.1016/0370-2693(79)90492-1.
- [41] A. S. Denisov *et al.*, “First results from a study of a 70 GeV proton beam being focused by a bent crystal,” *Nucl. Inst. Methods Phys. Res. B*, vol. 69, no. 2–3, pp. 382–384, Jun. 1992, doi: 10.1016/0168-583X(92)96034-V.
- [42] E. Bagli *et al.*, “Enhancement of the Inelastic Nuclear Interaction Rate in Crystals via Antichanneling,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 123, no. 4, p. 044801, Jul. 2019, doi: 10.1103/PhysRevLett.123.044801.
- [43] M. Posselt, “Channeling effects and defect accumulation in ion implantation,” *Nucl. Inst. Methods Phys. Res. B*, vol. 90, no. 1–4, pp. 373–377, May 1994, doi: 10.1016/0168-583X(94)95574-3.
- [44] J. U. Andersen, “Notes on Channeling.” pp. 1–137, 2015.
- [45] J. F. Ziegler, M. D. Ziegler, and J. P. Biersack, “SRIM - The stopping and range of ions in matter (2010),” *Nucl. Instruments Methods Phys. Res. Sect. B Beam Interact. with Mater. Atoms*, vol. 268, no. 11–12, pp. 1818–1823, 2010, doi: 10.1016/j.nimb.2010.02.091.
- [46] J. F. Ziegler, M. D. Ziegler, J. P. Biersack, and M. D. Ziegler, *SRIM: The Stopping and Range of Ions in Matter*, vol. 268, no. 11–12. Lulu, 2008.
- [47] A. F. Gurbich, “SigmaCalc recent development and present status of the evaluated cross-sections for IBA,” *Nucl. Instruments Methods Phys. Res. Sect. B Beam Interact. with Mater. Atoms*, vol. 371, pp.

- 27–32, Mar. 2016, doi: 10.1016/j.nimb.2015.09.035.
- [48] A. S. Galoyan and V. V. Uzhinsky, “Monte Carlo event generators for NICA/MPD and CBM experiments,” *Bull. Russ. Acad. Sci. Phys.* 2016 803, vol. 80, no. 3, pp. 333–337, May 2016, doi: 10.3103/S1062873816030138.
- [49] G. Santin, V. Ivanchenko, H. Evans, P. Nieminen, and E. Daly, “GRAS: A general-purpose 3-D modular simulation tool for space environment effects analysis,” *IEEE Trans. Nucl. Sci.*, vol. 52, no. 6, pp. 2294–2299, Dec. 2005, doi: 10.1109/TNS.2005.860749.
- [50] S. Meylan *et al.*, “Simulation of early DNA damage after the irradiation of a fibroblast cell nucleus using Geant4-DNA,” *Sci. Reports* 2017 71, vol. 7, no. 1, pp. 1–15, Sep. 2017, doi: 10.1038/s41598-017-11851-4.
- [51] GEANT4 collaboration, “Tracking — Book For Application Developers 11.1 documentation,” 2023. <https://geant4-userdoc.web.cern.ch/UsersGuides/ForApplicationDeveloper/html/TrackingAndPhysics/tracking.html> (accessed May 21, 2023).
- [52] G. Collaboration, “Energy Loss of Charged Particles — Physics Reference Manual 11.1 documentation,” 2023. https://geant4-userdoc.web.cern.ch/UsersGuides/PhysicsReferenceManual/html/electromagnetic/energy_loss/index.html (accessed May 21, 2023).
- [53] GEANT4 collaboration, “GEANT4 Physics Reference Manual. Release 10.6,” 2019. [Online]. Available: <https://geant4-userdoc.web.cern.ch/UsersGuides/ForToolkitDeveloper/BackupVersions/V10.6c/html/index.html>.
- [54] J. L’Ecuyer, J. A. Davies, and N. Matsunami, “How accurate are absolute rutherford backscattering yields,” *Nucl. Instruments Methods*, vol. 160, no. 2, pp. 337–346, Mar. 1979, doi: 10.1016/0029-554X(79)90612-8.
- [55] H. H. Andersen, F. Besenbacher, P. Loftager, and W. Möller, “Large-angle scattering of light ions in the weakly screened Rutherford region,” *Phys. Rev. A*, vol. 21, no. 6, pp. 1891–1901, Jun. 1980, doi: 10.1103/PhysRevA.21.1891.
- [56] J. R. MacDonald, J. A. Davies, T. E. Jackman, and L. C. Feldman, “How well does 4He backscattering from low-Z nuclei obey the Rutherford formula?,” *J. Appl. Phys.*, vol. 54, no. 4, p. 1800, Aug. 1998, doi: 10.1063/1.332813.
- [57] M. Kokkoris *et al.*, “Benchmarking the evaluated proton differential cross sections suitable for the EBS analysis of natSi and 16O,” *Nucl. Instruments Methods Phys. Res. Sect. B Beam Interact. with Mater. Atoms*, vol. 405, pp. 50–60, Aug. 2017, doi: 10.1016/j.nimb.2017.05.021.
- [58] M. Kokkoris, A. Kafkarkou, V. Paneta, R. Vlastou, P. Misaelides, and A. Lagoyannis, “Differential cross sections for the $^{11}\text{B}(p,\alpha)^8\text{Be}$

- and $^{11}\text{B}(p,p_0)^{11}\text{B}$ reactions, suitable for ion beam analysis,” *Nucl. Instruments Methods Phys. Res. Sect. B Beam Interact. with Mater. Atoms*, vol. 268, no. 24, pp. 3539–3545, Dec. 2010, doi: 10.1016/J.NIMB.2010.09.013.
- [59] A. F. Gurbich and C. Jeynes, “Evaluation of Non-Rutherford Alpha Elastic Scattering Cross-sections for Silicon,” *Nucl. Data Sheets*, vol. 119, pp. 270–272, May 2014, doi: 10.1016/j.nds.2014.08.074.
- [60] A. F. Gurbich and M. V. Bokhovko, “Non-Rutherford cross-sections for alpha elastic scattering off $Z = 28$ – 38 elements in the energy range up to 10 MeV,” *Nucl. Instruments Methods Phys. Res. Sect. B Beam Interact. with Mater. Atoms*, vol. 420, pp. 1–5, Apr. 2018, doi: 10.1016/J.NIMB.2018.01.026.
- [61] M. Chiari, M. Bianconi, I. Bogdanović Radović, and M. Mayer, “Benchmark measurements of non-Rutherford proton elastic scattering cross section for boron,” *Nucl. Instruments Methods Phys. Res. Sect. B Beam Interact. with Mater. Atoms*, vol. 343, pp. 70–76, Jan. 2015, doi: 10.1016/J.NIMB.2014.11.045.
- [62] P. Dimitriou, V. Semkova, and V. Zerkin, “Nuclear data for ion beam analysis applications,” *EPJ Web Conf.*, vol. 146, p. 9014, 2017, doi: 10.1051/epjconf/201714609014.
- [63] “IBANDL database.” <https://www-nds.iaea.org/exfor/ibandl.htm> (accessed May 12, 2022).
- [64] Alexander Gurbich, “SigmaCalc.” <http://sigmacalc.iate.obninsk.ru/> (accessed May 12, 2022).
- [65] M. J. Berger, J. S. Coursey, M. A. Zucker, and J. Chang, “Stopping-Power & Range Tables for Electrons, Protons, and Helium Ions,” *Nistir*, vol. 4999, pp. 1–17, 2017, doi: 10.18434/T4NC7P.
- [66] M. J. Berger *et al.*, “Report 49,” *J. Int. Comm. Radiat. Units Meas.*, vol. os25, no. 2, p. NP-NP, May 1993, doi: 10.1093/jicru/os25.2.report49.
- [67] H. Bethe, “Zur Theorie des Durchgangs schneller Korpuskularstrahlen durch Materie,” *Ann. Phys.*, vol. 397, no. 3, pp. 325–400, Jan. 1930, doi: 10.1002/ANDP.19303970303.
- [68] J. F. Ziegler, “Comments on ICRU Report No. 49: Stopping Powers and Ranges for Protons and Alpha Particles,” *Radiat. Res.*, vol. 152, no. 2, pp. 219–222, Aug. 1999, doi: 10.2307/3580097.
- [69] H. Tai, H. Bichsel, J. W. Wilson, J. L. Shinn, F. A. Cucinotta, and F. F. B. Christopher, “Comparison of Stopping Power and Range Databases for Radiation Transport Study,” *NASA Tech. Pap. 3644*, 1997.
- [70] P. Sigmund, A., Schinner, H., Paul, H., Geissel, and R., Bimbot, “Stopping of ions heavier than helium,” *J. Int. Comm. Radiat. Units Meas.*, vol. 5, no. 1, pp. iii–viii, Jun. 2005, doi: 10.1093/jicru/ndi002.
- [71] H. Weick, “ATIMA webpage,” 2021. <http://web->

- docs.gsi.de/~weick/atima/.
- [72] J. F. Ziegler and J. P. Biersack, “The Stopping and Range of Ions in Matter,” in *Treatise on Heavy-Ion Science*, Springer US, 1985, pp. 93–129.
- [73] J. Lindhard and A. H. Sorensen, “Relativistic theory of stopping for heavy ions,” *Phys. Rev. A*, vol. 53, no. 4, p. 2443, Apr. 1996, doi: 10.1103/PhysRevA.53.2443.
- [74] H. Paul, “Recent results in stopping power for positive ions, and some critical comments,” *Nucl. Instruments Methods Phys. Res. Sect. B Beam Interact. with Mater. Atoms*, vol. 268, no. 22, pp. 3421–3425, Nov. 2010, doi: 10.1016/J.NIMB.2010.09.001.
- [75] H. Paul and D. Sánchez-Parcerisa, “A critical overview of recent stopping power programs for positive ions in solid elements,” *Nucl. Instruments Methods Phys. Res. Sect. B Beam Interact. with Mater. Atoms*, vol. 312, pp. 110–117, Oct. 2013, doi: 10.1016/J.NIMB.2013.07.012.
- [76] N. Bohr, “II. On the theory of the decrease of velocity of moving electrified particles on passing through matter,” *London, Edinburgh, Dublin Philos. Mag. J. Sci.*, vol. 25, no. 145, pp. 10–31, Jan. 1913, doi: 10.1080/14786440108634305.
- [77] J. Lindhard and M. Scharff, “Energy loss in matter by fast particles of low charge,” *Mat. Meddelelser udgivet af Det K. Danske Vidensk. Selsk.*, vol. 27, no. 15, 1953.
- [78] W. K. Chu, “Calculation of energy straggling for protons and helium ions,” *Phys. Rev. A (General Physics)*, vol. 13, no. 6, pp. 2057–2060, Jun. 1976, doi: 10.1103/PhysRevA.13.2057.
- [79] Q. Yang, D. J. O’Connor, and Z. Wang, “Empirical formulae for energy loss straggling of ions in matter,” *Nucl. Inst. Methods Phys. Res. B*, vol. 61, no. 2, pp. 149–155, Aug. 1991, doi: 10.1016/0168-583X(91)95454-L.
- [80] N. Bohr, *The Penetration of Atomic Particles Through Matter*. Munksgaard, 1948.
- [81] W. K. Chu and J. F. Ziegler, “Energy Loss and Energy Straggling,” in *Ion Beam Handbook for Material Analysis*, Elsevier, 1977, pp. 1–19.
- [82] GEANT4 collaboration, “Physics Reference Manual 10.6,” *Ch. 12.2.3 Fluctuations of energy losses of hadrons*, 2020. <http://cern.ch/geant4> (accessed Aug. 28, 2020).
- [83] M. Mayer, “SIMNRA User’s Guide; SIMNRA User’s Guide,” 2017, doi: 10.1063/1.59188.
- [84] H. Bichsel, “Multiple Scattering of Protons,” *Phys. Rev.*, vol. 112, no. 1, p. 182, Oct. 1958, doi: 10.1103/PhysRev.112.182.
- [85] E. Szilágyi, F. Pászti, and G. Amsel, “Theoretical approximations for depth resolution calculations in IBA methods,” *Nucl. Inst. Methods*

- Phys. Res. B*, vol. 100, no. 1, pp. 103–121, May 1995, doi: 10.1016/0168-583X(95)00186-7.
- [86] G. Amsel, G. Battistig, and A. L’Hoir, “Small angle multiple scattering of fast ions, physics, stochastic theory and numerical calculations,” *Nucl. Instruments Methods Phys. Res. Sect. B Beam Interact. with Mater. Atoms*, vol. 201, no. 2, pp. 325–388, Feb. 2003, doi: 10.1016/S0168-583X(02)01740-8.
- [87] J. F. Ziegler, “RBS/ERD simulation problems: Stopping powers, nuclear reactions and detector resolution,” *Nucl. Instruments Methods Phys. Res. Sect. B Beam Interact. with Mater. Atoms*, vol. 136–138, pp. 141–146, Mar. 1998, doi: 10.1016/S0168-583X(97)00664-2.
- [88] J. L. Colaun, G. Terwagne, and C. Jeynes, “On the traceably accurate voltage calibration of electrostatic accelerators,” *Nucl. Instruments Methods Phys. Res. Sect. B Beam Interact. with Mater. Atoms*, vol. 349, pp. 173–183, Apr. 2015, doi: 10.1016/j.nimb.2015.02.048.
- [89] K. Pearson, “X. On the criterion that a given system of deviations from the probable in the case of a correlated system of variables is such that it can be reasonably supposed to have arisen from random sampling,” *London, Edinburgh, Dublin Philos. Mag. J. Sci.*, vol. 50, no. 302, pp. 157–175, Jul. 1900, doi: 10.1080/14786440009463897.
- [90] D. Lingis, M. Gaspariūnas, V. Kovalevskij, A. Plukis, and V. Remeikis, “A model to simulate large angle Rutherford backscattering spectra in GEANT4,” *Comput. Phys. Commun.*, vol. 271, p. 108187, Feb. 2022, doi: 10.1016/J.CPC.2021.108187.
- [91] E. Bagli, V. Guidi, and V. A. Maishev, “Calculation of the potential for interaction of particles with complex atomic structures,” *Phys. Rev. E - Stat. Nonlinear, Soft Matter Phys.*, vol. 81, no. 2, p. 026708, Feb. 2010, doi: 10.1103/PhysRevE.81.026708.
- [92] C. Kittel, *Introduction to Solid State Physics*, 8th ed., vol. 8. John Wiley & Sons, 2004.
- [93] A. Dygo, P. J. M. Smulders, and D. O. Boerma, “Simulation analysis of ion channeling spectra: thermal vibrational amplitude in Si,” *Nucl. Inst. Methods Phys. Res. B*, vol. 64, no. 1–4, pp. 701–705, Feb. 1992, doi: 10.1016/0168-583X(92)95561-5.
- [94] C. Y. Ho, R. W. Powell, and P. E. Liley, “Thermal conductivity of the elements: a comprehensive review,” *J. Phys. Chem. Ref. Data*, vol. 3, no. 1, pp. 1–796, 1974.
- [95] A. Hössinger, “Simulation of Ion Implantation for ULSI Technology,” Vienna University of Technology, 2000.
- [96] C. Runge, “Ueber die numerische Auflösung von Differentialgleichungen,” *Math. Ann.* 1895 462, vol. 46, no. 2, pp. 167–178, Jun. 1895, doi: 10.1007/BF01446807.
- [97] W. Kutta, “Beitrag zur näherungsweise Integration totaler Differentialgleichungen,” *Zeitschrift für Math. und Phys.*, vol. 46, pp.

- 435–453, 1901.
- [98] P. J. M. Smulders, A. Dygo, and D. O. Boerma, “Giant focusing peak and potential dependence observed in a transition from axial to planar channeling in Si,” *Nucl. Instruments Methods Phys. Res. Sect. B Beam Interact. with Mater. Atoms*, vol. 67, no. 1–4, pp. 185–188, Apr. 1992, doi: 10.1016/0168-583X(92)95798-V.
- [99] W. Scandale *et al.*, “High-efficiency deflection of high energy protons due to channeling along the <110> axis of a bent silicon crystal,” *Phys. Lett. B*, vol. 760, pp. 826–831, 2016, doi: 10.1016/j.physletb.2016.07.072.
- [100] E. Acerbi, C. Birattari, B. Candoni, M. Castiglioni, and C. Succi, “Channeling of high-energy protons in Si and W,” *Nuovo Cim. B* 1975 292, vol. 29, no. 2, pp. 257–269, Oct. 1975, doi: 10.1007/BF02728309.
- [101] A. R. Sattler and G. Dearnaley, “Channeling in Diamond-Type and Zinc-Blende Lattices: Comparative Effects in Channeling of Protons and Deuterons in Ge, GaAs, and Si,” *Phys. Rev.*, vol. 161, no. 2, p. 244, Sep. 1967, doi: 10.1103/PhysRev.161.244.
- [102] F. R. L. Schoening and L. A. Vermeulen, “X-ray measurement of the Debye temperature for diamond at low temperatures,” *Solid State Commun.*, vol. 7, no. 1, pp. 15–18, Jan. 1969, doi: 10.1016/0038-1098(69)90682-6.
- [103] A. Zywietz, K. Karch, and F. Bechstedt, “Influence of polytypism on thermal properties of silicon carbide,” *Phys. Rev. B. Condens. Matter*, vol. 54, no. 3, pp. 1791–1798, 1996, doi: 10.1103/PHYSREVB.54.1791.
- [104] O. L. Anderson, “Determination and Some Uses of Isotropic Elastic Constants of Polycrystalline Aggregates Using Single-Crystal Data,” *Phys. Acoust.*, vol. 3, pp. 43–95, Jan. 1965, doi: 10.1016/B978-0-12-395669-9.50009-6.
- [105] P. Heyliger, H. Ledbetter, and S. Kim, “Elastic constants of natural quartz,” *J. Acoust. Soc. Am.*, vol. 114, no. 2, p. 644, Jul. 2003, doi: 10.1121/1.1593063.
- [106] D. S. Gemmell, “Channeling and related effects in the motion of charged particles through crystals,” *Rev. Mod. Phys.*, vol. 46, no. 1, Jan. 1974, doi: 10.1103/RevModPhys.46.129.
- [107] X. A. Aslanoglou, P. A. Assimakopoulos, M. Kokkoris, and E. Kossionides, “Simulations of channeling spectra in the system $p+^{28}\text{Si}$,” *Nucl. Instruments Methods Phys. Res. Sect. B Beam Interact. with Mater. Atoms*, vol. 140, no. 3–4, pp. 294–302, May 1998, doi: 10.1016/S0168-583X(98)00112-8.
- [108] M. Kokkoris, G. Perdikakis, S. Kossionides, S. Petrovic, and E. Simoen, “On the dechanneling of protons in Si [110],” *Eur. Phys. J. B - Condens. Matter Complex Syst.* 2003 343, vol. 34, no. 3, pp. 257–

- 263, 2003, doi: 10.1140/EPJB/E2003-00219-Y.
- [109] X. A. Aslanoglou *et al.*, “Simulations and comparisons of channeling spectra in the p+28Si system in the backscattering geometry,” *Nucl. Instruments Methods Phys. Res. Sect. B Beam Interact. with Mater. Atoms*, vol. 161–163, pp. 524–527, Mar. 2000, doi: 10.1016/S0168-583X(99)00781-8.
- [110] M. Kokkoris *et al.*, “Determination of parameters for channeling of protons in SiC polytype crystals in the backscattering geometry,” *Nucl. Instruments Methods Phys. Res. Sect. B Beam Interact. with Mater. Atoms*, vol. 184, no. 3, pp. 319–326, Nov. 2001, doi: 10.1016/S0168-583X(01)00727-3.
- [111] M. Kokkoris, R. Vlastou, X. A. Aslanoglou, E. Kossionides, R. Grötzschel, and T. Paradellis, “Determination of the stopping power of channeled protons in SiO₂ in the backscattering geometry,” *Nucl. Instruments Methods Phys. Res. Sect. B Beam Interact. with Mater. Atoms*, vol. 173, no. 4, pp. 411–416, Feb. 2001, doi: 10.1016/S0168-583X(00)00432-8.
- [112] M. Erich, M. Kokkoris, S. Fazinić, and S. Petrović, “EBS/C proton spectra from a virgin diamond crystal,” *Nucl. Instruments Methods Phys. Res. Sect. B Beam Interact. with Mater. Atoms*, vol. 381, pp. 96–102, Aug. 2016, doi: 10.1016/J.NIMB.2016.05.030.
- [113] R. Ankit, “WebPlotDigitizer.” Pacifica, California, USA, 2022, [Online]. Available: <https://automeris.io/WebPlotDigitizer/index.html>.
- [114] P. Bauer, E. Steinbauer, and J. P. Biersack, “The width of an RBS spectrum: influence of plural and multiple scattering,” *Nucl. Instruments Methods Phys. Res. Sect. B Beam Interact. with Mater. Atoms*, vol. 64, no. 1–4, pp. 711–715, Feb. 1992, doi: 10.1016/0168-583X(92)95563-7.

GYVENIMO APRAŠYMAS

Danielius Lingis įgijo Energetikos fizikos bakalauro (2015 m.) bei Aplinkos ir cheminės fizikos magistro (2017 m.) laipsnius Vilniaus Universitete. Bakalauro ir magistro studijų baigiamieji darbai buvo rengiami FTMC Branduolinių tyrimų skyriuje, o darbų vadovas buvo Dr. Artūras Plukis. Bakalauro baigiamojo darbo metu patobulintas plutonio–berilio neutronų šaltinio skaitinis modelis MCNP programinio paketo aplinkoje, susipažinta su neutronų aktyvacinės analizės metodu. Magistro studijų metu buvo sukurtas RBMK reaktoriaus kuro rinklės su grafitu modelis GEANT4 programinėje aplinkoje, taip pat naudojant SRIM, SPECTRA–PKA, NJOY ir kitus programinius įrankius buvo atlikti teoriniai jonų sąveikos su medžiaga vertinimai, apskaičiuotas teorinis pažaidų susidarymas tiek jonų, tiek ir reaktoriaus neutronų atvejais.

Doktorantūros studijoms pasirinkta lengvųjų jonų kanaliavimo tyrimų tematika. Studijų laikotarpiu bandyta pasiruošti eksperimentams, tačiau dėl eksperimentinės įrangos problemų darbo kryptis buvo pakeista. Studijų metu buvo sukurtas teorinis atgalinės sklaidos modelis GEANT4 programinio paketo aplinkoje, skirtas skaitiškai modeliuoti RBS nuo amorfinių medžiagų. Modelis buvo validuotas 1 – 3 MeV energijų intervale naudojant protonų, helio branduolių ir ličio jonų eksperimentinius rezultatus. Bandant pritaikyti modelį kanaliavimo geometrijai, susidurta su kanaliavimo modelio trūkumais. Studijų metu dalelių kanaliavimo modelis buvo patobulintas, įvertintas modelio tikslumas dalelių energijos nuostolių skaičiavime, nustatytos optimalios modeliavimo sąlygos. Patobulinus dalelių kanaliavimo modelį, atgalinės sklaidos nuo amorfinių medžiagų modelis buvo patobulintas leidžiant skaitiškai modeliuoti kanaliuojančių dalelių RBS spektrus. Atgalinės sklaidos spektrų validavimas atliktas 1 – 3 MeV energijos protonams Si, SiC, SiO₂ ir deimanto kristaluose dalelėms kanaliuojant išilgai pagrindinių kristalografinių krypčių. Rezultatai parodė, kad teorinis modelis pakankamai tiksliai skaitiškai modeliuoja atgalinę sklaidą ir gali būti naudojamas parametų parinkimui prieš atliekant eksperimentus.

Studijų metu doktorantas dalyvavo keletose nacionalinių ir tarptautinių mokslinių konferencijų, taip pat mokymuose. Doktorantas gavo LMT paramą už mokslinius pasiekimus. Stažuotėse doktorantas nedalyvavo.

PADĖKA

Sąrašas žmonių, kuriems dėkoju yra ilgesnis, nei bus nurodytas čia. Paprasčiausiai neįmanoma išvardinti visų žmonių, kurie man padėjo šiame kelyje nuo bakalauro studijų. Pradedant dėstytojais, kurie atsakydavo į keisčiausius studentų klausimus ir idėjas, pereinant prie mokslinių vadovų, kurie kartais per mažai, o kartais per daug bandydavo sukontroliuoti mano idėjas ir darbus, baigiant šeima ir draugais, kurie palaikė visame streso, nervų, nevilties ir džiaugsmo kelyje. Atskirai norėčiau padėkoti:

Prof. habil. dr. Vidmantui Remeikiui už suteiktą galimybę būti branduolinių tyrimų skyriaus, o kartu ir FTMC dalimi;

Dr. Artūriui Plukiui ir Dr. Vitalij Kovalevskij dėkoju už vadovavimą darbui, teisingą kritiką ir diskusijas dėl idėjų;

Dr. Elenai Lagzdinai, kuri vedė mane šiame kelyje nuo bakalauro laikų ir visada patardavo, paguosdavo bei nuramindavo neramiais laikais;

Mindaugui Gaspariūnui, kuris perdavė savo praktines ir teorines žinias, padėjo greitai integruotis į naują kryptį. Dėkoju už diskusijas, už patarimus, už bemieges naktis atliekant spektrų analizę.

Konstantinui Birzul už praktines žinias, elektronikos ir schemų supratimo mokymą, diskusijas apie greitintuvą, pensijas ir Černobylių.

Šeimai ir draugams, kurie suprato ir palaikė mane šioje kelionėje.

O labiausiai savo žmonai Tatianai, kuri yra mano mūza, mano jėgų šaltinis, mano palaikymas. Be tavęs šio disertacinio darbo nebūtų buvę, tai praktiškai parašėm jį kartu.

Esu dėkingas visiems kitiems, kurių čia nepaminėjau, bet kurie sekė mano progresą, įkvėpė naujų idėjų ir palaikė sunkiais momentais.

Disertacinį darbą skiriu savo mamos Viktorijos šviesiam atminimui. Ji visada tikėjo manimi, žinojo, kad galiu, tačiau taip ir nesulaukė šios disertacijos pabaigos.

PUBLIKACIJU SĀRAŠAS

1. **D. Lingis**, M. Gaspariūnas, V. Kovalevskij, A. Plukis, V. Remeikis, „A model to simulate large angle Rutherford backscattering spectra in GEANT4”, Computer Physics Communications Vol. 271, (2022), <https://doi:10.1016/j.cpc.2021.108187>. **IF: 6.3, 2022 Q1**
2. **D. Lingis**, M. Gaspariūnas, A. Plukis, V. Remeikis, “Improvements and validation of particle channeling model in GEANT4”, Nucl. Instruments Methods Phys. Res Sect. B Beam Interact. with Mater. Atoms, Vol. 525, p. 1–12, (2022), <https://doi:10.1016/j.nimb.2022.05.007>. **IF: 1.3, 2022 Q2.**
3. **D. Lingis**, M. Gaspariūnas, V. Kovalevskij, A. Plukis, V. Remeikis, „Simulation of large angle Rutherford backscattering spectra of channeled protons in GEANT4“, Nucl. Instruments Methods Phys. Res Sect. B Beam Interact. with Mater. Atoms., Vol. 543, 165091, <https://doi.org/10.1016/j.nimb.2023.165091>. **IF: 1.3, 2022 Q2.**

UŽRAŠAMS

Vilniaus universiteto leidykla
Saulėtekio al. 9, III rūmai, LT-10222 Vilnius
El. p. info@leidykla.vu.lt, www.leidykla.vu.lt
bookshop.vu.lt, journals.vu.lt
Tiražas 20 egz.