

Универзитет у Београду

Физички Факултет

Никола Старчевић

Дугин потенцијал интеракције јона и
кристала при каналисању

-Докторска Дисертација-

Институт за нуклеарне науке „Винча“, 2022.

University of Belgrade

Faculty of Physics

Nikola Starčević

Ion-crystal rainbow interaction potential in channeling

-Doctoral Dissertation-

Vinča Institute of Nuclear Sciences, 2022.

Комисија за преглед и оцену докторске дисертације:

Ментор:

Др. Срђан Петровић
Научни саветник
Институт за нуклеарне науке „Винча“

Члан комисије:

Др. Срђан Петровић
Научни саветник
Институт за нуклеарне науке „Винча“

Члан комисије:

Др. Горан Попарић
Редовни професор
Физички Факултет Универзитет у Београду

Члан комисије:

Др. Саво Галијаш
Доцент
Физички Факултет Универзитет у Београду

Члан комисије:

Др. Едиб Добацић
Ванредни професор
Физички Факултет Универзитет у Београду

Члан комисије:

Др. Зоран Поповић
Доцент
Физички Факултет Универзитет у Београду

Датум одбране: __.__.____

Ова дисертација је рађена у Лабораторији за физику 010 Института за нуклеарне науке „Винча“ у Београду.

Подаци о докторској дисертацији

Наслов докторске дисертације: Дугин потенцијал интеракције јона и кристала при каналисању

Сажетак:

Један од најважнијих ефеката при кретању позитивних јона кроз оријентисане кристале у односу на сноп јона је ефекат дуге. Конструисање прецизног потенцијала интеракције каналисаног јона у кристалу је главни циљ ове дисертације. Проблем прецизног јон - атом потенцијала интеракције је један од основних проблема у описивању јон - кристал интеракције. Ова интеракција укључује и ефекте везане за интеракцију са електронским гасом кристала, као што је енергијски губитак јона и неодређеност његовог угла/импулса, нуклеарне реакције са атомима кристала, избацијање атома из свог равнотежног положаја и стварање тзв. каскадног процеса. У овој дисертацији ови ефекти ће бити занемарени зато што смо испитивали довољно танке кристале и одговарајућу енергију јона. Претпоставља се да се јон - атом интеракција може третирати као двочестични сударни процес и да је при томе потенцијал интеракције екранирани Кулонов потенцијал.

Ефекат кристалне дуге предвиђен је у теоријској анализи трансмисије позитивних јона кроз аксијалне канале танких кристала, помоћу модела који је користио тзв. импулсну апроксимацију, која важи када је енергија јона довољно велика, односно дебљина кристала довољно мала, да се трајекторије трансмитованих јона могу описати правим линијама. Након тога формулисана је теорија кристалне дуге тако да укључује и закривљене трајекторије, односно дебље кристале. Угаоне расподеле трансмитованих протона, које су доступне мерењу, добијене су нумерички, решавањем једначина кретања јона у кристалу и коришћењем метода компјутерске симулације. Експериментална мерења су показала да су предвиђања модела и теорије кристалне дуге исправна. Показано је да линије дуге представљају „скелет“ угаоних расподела каналисаних јона.

Теорија кристалних дуга је употребљена за морфолошки метод конструисања јон - атом потенцијала интеракције, у анализи секвенце експериментално добијених угаоних расподела високе резолуције протона енергије 2 MeV и Si^{14} кристалне мембране оријентације (001). Конструисање дугог потенцијала интеракције је добијено модификовањем Молијеровог потенцијала интеракције на начин који ће га учинити прецизним у целом простору канала кристала, тј. близу осе канала и близу атомских низова који дефинишу канал. Ова модификација је урађена прилагођавањем облика линија дуга, тако да одговарајуће теоријске угаоне расподеле трансмитованих протона буду у одличном слагању са одговарајућим експерименталним расподелама за енергије протона од 2 MeV , 1.5 MeV , 1 MeV и 0.7 MeV . На овај начин је успешно добијен дугин протон - силицијум потенцијал интеракције при каналисању.

Након тога је конструисан универзални аксијални (001) дугин јон - атом потенцијал интеракције за случај каналисања протона у случају следећих 28 кубних кристала: *FCC* кристалне структуре, алуминијум Al^{13} , калцијум Ca^{20} , никл Ni^{28} , бакар Cu^{29} , стронцијум Sr^{38} , родијум Rh^{45} , паладијум Pd^{46} , злато Au^{79} , олово Pb^{82} и торијум Th^{90} ; *BCC* кристалне структуре: ванадијум V^{23} , хром Cr^{24} , гвожђе Fe^{26} , ниобијум Nb^{41} , молибден Mo^{42} , баријум Ba^{56} , еуропијум Eu^{63} , танталијум Ta^{73} и

волфрам W^{74} ; и са дијамантском кристалографском структуром: угљеник C^6 , силицијум Si^{14} , германијум Ge^{32} и калај Sn^{50} .

Даља анализа каналисања протона у случају горе поменутих 28 кубних кристала узимањем у обзир истовремено две оријентације (001) и (111) је проширена и побољшана. Као резултат два аксијална правца каналисања су могла бити третирана користећи исте физичке аргументе, што је довело до конзистентних вредности параметара фитовања потенцијала интеракције.

У закључку тезе је поменут даљи рад у коме би се теоријски анализирали резултати за каналисање протона и кубних кристала оријентације (110). Ови случајеви нису третирани у овој дисертацији пошто геометрија канала кристала у оријентацији (110) зависи од кристалографске структуре, односно добијају се различити типови канала за FCC , BCC и дијаманску структуру, што значајно усложњава добијање дугиног потенцијала интеракције.

Кључне речи: Кристалне дуге, каналисање позитивних јона, веома танки кристали, потенцијал интеракције, нумеричка симулација.

Научна област: Физика

Ужа научна област: Примењена и компјутерска физика

Doctoral dissertation title: Ion-crystal rainbow interaction potential in channeling

Abstract:

One of the most important effects in the movement of positive ions through oriented crystals relative to an ion beam is the rainbow effect. Construction of an accurate interaction potential of the channeled ion in the crystal is the main goal of this thesis. The problem of accurate ion - atom interaction potential is one of the fundamental problems in describing ion - crystal interaction. This interaction includes effects related to the interaction with the electron gas of the crystal, such as energy loss of the ion and the uncertainty of its angle/momentum, nuclear reactions with crystal atoms, ejection of atoms from their equilibrium position and the creation of so-called cascade process. In this dissertation, these effects will be neglected because we examined sufficiently thin crystals and corresponding ion energies. It is assumed that ion - atom interactions can be treated as an two - particle collision process and that the interaction potential is a screened Coulomb potential.

The effect of the crystal rainbow is predicted in the theoretical analysis of the transmission of positive ions through axial channels of thin crystals using a so-called impulse approximation model, which is valid when the ion energy is large enough or the crystal thickness is small enough that the trajectories of transmitted ions can be described by straight lines. After that, the crystal rainbow theory was formulated including curved trajectories or thicker crystals. The angular distributions of the transmitted protons available for measurement were determined numerically by solving the equations of motion of ions in the crystal and using computer simulation methods. Experimental measurements have shown that the predictions of the crystal rainbow model and theory are correct. It was shown that the rainbow lines represent the „skeleton“ of the angular distributions of the channeled ions.

The crystal rainbow theory was used for the morphological method to construct ion - atom interaction potentials in the sequence analysis of experimentally obtained high - resolution angular distributions of protons with energy of 2 MeV and a Si^{14} crystal membrane in the (001) orientation. The construction of the rainbow interaction potential is obtained by modifying the Moliere interaction potential so that it becomes precise in the whole space of the crystal channel, i.e. near the channel axis and near the atomic strings defining the channel. This modification was performed by adjusting the shape of the rainbow lines in a way that the corresponding theoretical angular distributions of the transmitted protons were in excellent agreement with the corresponding experimental distributions for proton energies of 2 MeV, 1.5 MeV, 1 MeV and 0.7 MeV. In this way, the rainbow proton - silicon interaction potential for channeling was successfully obtained.

After that, a universal axial (001) rainbow ion - atom interaction potential was constructed for the case of proton channeling in the following 28 cubic crystals: FCC crystal structure: aluminum Al^{13} , calcium Ca^{20} , nickel Ni^{28} , copper Cu^{29} , strontium Sr^{38} , rhodium Rh^{45} , palladium Pd^{46} , gold Au^{79} , lead Pb^{82} and thorium Th^{90} ; BCC crystal structures: vanadium V^{23} , chromium Cr^{24} , iron Fe^{26} , niobium Nb^{41} , molybdenum Mo^{42} , barium Ba^{56} , europium Eu^{63} , tantalum Ta^{73} and tungsten W^{74} ; and with diamond crystallographic structure: carbon C^6 , silicon Si^{14} , germanium Ge^{32} and tin Sn^{50} .

Furthermore, the analysis of the proton channeling in the case of the above mentioned 28 cubic crystals was extended and improved by considering two orientations (001) and (111) simultaneously. As a result, the two axial channeling directions could be treated with the same physical arguments, leading to consistent values of the interaction potential fitting parameters.

In the conclusion of the thesis, further work was mentioned in which the results for protons channeling through cubic crystals in orientation (110) would be theoretically analyzed. These cases are not considered in this thesis because the geometry of the crystal channels in orientation (110) depends on the crystallographic structure, ie. different types of channels are obtained for *FCC*, *BCC* and diamond structure, which makes obtaining the rainbow interaction potential much more difficult.

Keywords: Crystal rainbow, Ion Channeling, Very thin crystals, Interaction potential, Numerical simulation.

Field of science: Physics

Research area: Applied and Computer Physics

Садржај:

1. Увод	1
1.1. Кристали	1
1.2. Физичка својства кристала	5
1.3. Каналисање наелектрисаних честица у кристалу	5
1.4. Увод у тематику дисертације	6
1.5. Оптичка (метеоролошка) дуга	8
1.6. Честичне дуге	12
2. Основи теорије каналисања јона кроз кристал	16
2.1. Примена класичне механике	18
2.2. Потенцијал интеракције јона и кристала	18
2.3. Континуални потенцијал интеракције	20
2.4. Термалне вибрације атома	21
2.5. Енергијски губитци каналисаног јона кроз кристал	23
2.6. Критични угао за каналисање	23
3. Кристална дуга	25
4. Опис нумеричког прорачуна каналисања	33
5. Одређивање потенцијала интеракције протона и силицијума на основу ефекта дуге у каналисању	36
6. Универзални дугин потенцијал интеракције у случају квадратних канала кубних кристала	51
7. Универзални дугин потенцијал интеракције у случају троугаоних канала кубних кристала	78
7.1. Зависност дугог потенцијала интеракције од енергије протона	99
8. Закључак	110
9. Литература	112

1. УВОД

Физика је наука која проучава материју, енергију и промене [1]. Свет физике се изучава преко експеримената, тј. све теорије физике су проверене и потврђене кроз експерименте. За разлику од математике, физика има смисла само за могуће догађаје у физичком свету. Теорије у физици могу бити елегантне или задовољавајуће, али ако нису у складу са догађајима онда су без вредности.

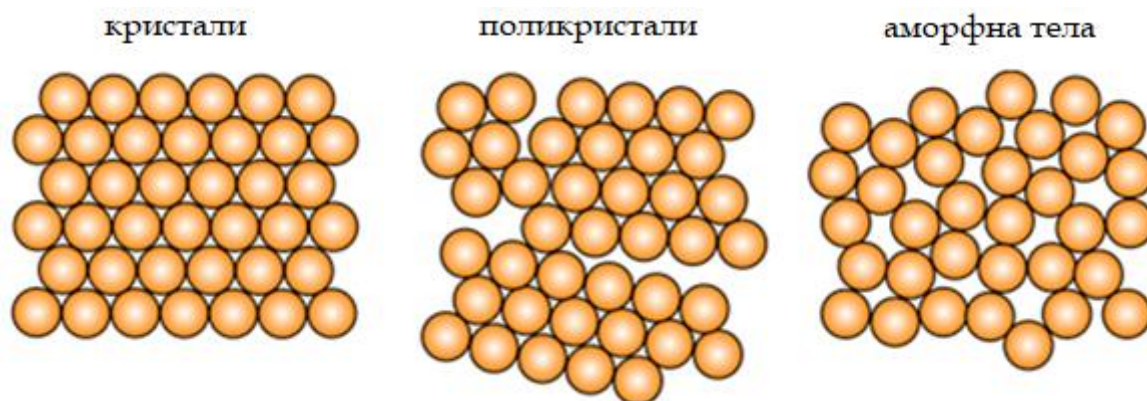
Један од првих експерименталних научника и зачетника савремене науке био је Галилеј, па се може рећи да је „златна ера“ науке почела са њим [2]. Пре Галилеа, наука је углавном била филозофска (првобитни назив је био филозофија природе), што је значило да теорија није била математички потврђена, нити је била праћена експериментом. Физичари данас праве разлику између класичне и модерне физике. Класична физика је назив који дајемо физичким теоријама пре двадесетог века, иако ове теорије нису престале да се развијају и до данашњег дана.

Сва физичка и хемијска материја је сачињена од атома [3]. Основна подела материје према агрегатном стању је подела на чврста тела, течности, гасове и плазму. Свака чврста супстанца, течност, гас и/или плазма се састоје из неутралних или јонизованих атома. Атом је најмањи саставни део материје који носи особине хемијског елемента.

Пошто је тема дисертације кретање позитивно наелектрисаних честица кроз кристална тела, даље у тексту ће чврста кристална тела бити детаљније описана.

1.1. Кристали

Чврсто тело је једно од агрегатних стања материје. Чврста тела се према саставу деле на аморфна и кристална. Кристали или кристална чврста тела су материјали чији су саставни делови (атоми, молекули или јони) распоређени у веома уређену микроскопску структуру. Чврсте кристалне структуре могу бити у облику засебних јединствених кристала - монокристала и у облику скупљених и хаотично оријентисаних ситних кристала - поликристала. Реч кристал потиче од античке Грчке речи „κρύσταλλος“ (*krustallos*), што значи и „лед“ и „камени кристал“, а у чијој се основи налази реч „κρύος“ (*krucos*) која значи „ледена хладноћа, мраз“.



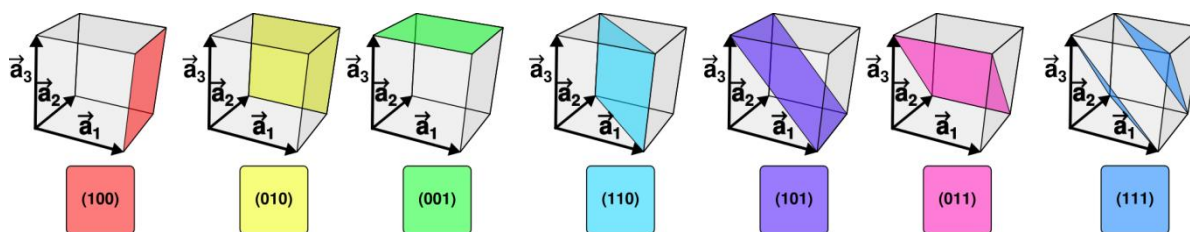
Слика 1.1. Подела чврстих тела према њиховом саставу.

Класификација кристала је заснована на микроскопском уређењу атома унутар њега, које се зове кристална структура [4]. Правилност и симетрија облика кристала указују да су они образовани од индентичних изграђивачких делова који

се правилно (периодично) понављају у све три просторне димензије. Кристалну структуру карактерише њена Бравеова решетка. Структура сваког кристала се може описати помоћу Бравеове решетки и групе атома, или молекула која се придружује сваком чвору ове решетки и поставља у сваки елементарни паралелопипед. Правилним понављањем ових група у тродимензионалном простору се образује кристал. Периодична решетка је дефинисана помоћу три основна некомпланарна вектора трансляције $\vec{a}$, $\vec{b}$ и $\vec{c}$ тако да се положај било ког чвора у односу на неки референтни систем може одредити из релације $\vec{r} = m\vec{a} + n\vec{b} + p\vec{c}$, где су m , n и p произвољни цели бројеви, који се зову индекси чворова. Скуп ова три индекса написан у двострукој средњој загради без зареза између $[[mnp]]$ представља симбол чвора, односно начин његовог обележавања у кристалографији. Ова три вектора граде елементарни паралелопипед, тј. елементарну ћелију кристала. У општем случају елементарна ћелија је дефинисана параметерима решетки $|a|$, $|b|$, $|c|$, α , β и γ , где су $|a|$, $|b|$ и $|c|$ дужине ивица елементарне ћелије, а углови између њих су α , β и γ , респективно. Позиције атома унутар ћелије су описане сетом атомских позиција $[[x_i, y_i, z_i]]$ који се одређују у односу на референтну тачку ћелије.

За обележавање оријентације кристалне решетки се користе чворне равни и чворне праве [4]. Чворна раван која пролази кроз три чвора решетки, који не припадају једној чворној правој, садржи целу мрежу чворова. Систем паралелних чворних равни, које се налазе на једнаком међусобном растојању, образују фамилију равни. Свака просторна решетка може бити представљена фамилијама чворних равни на произвољно много различитих начина. Да би се одредила просторна оријентација било које чворне равни довољно је познавати њену оријентацију у односу на изабрани координатни почетак и међураванско растојање d . За чворну раван која са координатним осама гради одсечке $A = ma$, $B = nb$ и $C = pc$, где су a , b и c константе решетки, а m , n и p цели бројеви или разломци, могу се одредити индекси равни или Милерови индекси на следећи начин: за реципрочне вредности бројева m , n и p се нађе најмањи заједнички садржалац који се означава са D и одреде се бројеви $h = D/m$, $k = D/n$ и $l = D/p$, где су h , k и l Милерови индекси. Чворна раван, а самим тиме и цела фамилија паралелних чворних равни се означава овим индексима у малој загради без зареза $(h k l)$. По дефиницији синтакса $(h k l)$ означава раван која пресеца три тачке у ћелији $(a/l, b/m, c/n)$ или неки њихов умножак. Ако је, нпр. један од ових индекса/бројева бесконачан то значи да је чворна раван паралелна са једном од координатних оса, тј. са осом која одговара том индексу. Даље у тексту дисертације оријентација равни ће се означавати са обичним заградама $(x y z)$ где су x , y и z цели бројеви и ова оријентација ће бити у односу на нормално оријентисан правац снопа упадних позитивних јона (протона) који ће се означавати у угаоним заградама $[x y z]$, где су x , y и z такође цели бројеви. Растојање d између кристалографских равни исте фамилије које су одређене индексима $(h k l)$ зависи од вредности ових индекса и од константе решетки. Ова зависност је релативно сложена за већину кристалографских система, а најпростија је за кубне кристалографске системе код којих се константа решетки одређује на следећи начин:

$$d = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}.$$



Слика 1.2. Равни са различитим Милеровим индексима у кубним кристалима.

Сви монокристали поседују одређену врсту симетрије [5], која подразумева да они садрже једнаке и на исти начин распоређене делове. Услед ових симетрија, обртањем око неке осе, огледањем у некој тачки или равни, кристална структура може да се поклопи са самом собом. Код кристала су могуће осе симетрије транслације, обртна оса симетрије, центар симетрије и др. Симетрија кристала је ограничена захтевом да јединичне ћелије буду савршено упаковане једна до друге без размака. Осе симетрије код кристала могу бити првог, другог, трећег, четвртог и шестог реда. Осе симетрије петог, седмог и виших редова не постоје, јер није могуће направити правилну затворену полиедарску површ од петоугаоника, седмоугаоника и вишеугаоника. Број елемената симетрије је ограничен и од 5 простих и 5 огледаских оса симетрије могу да се реализују укупно 32 класе симетрије и још транслациона симетрија, која за разлику од других не делује на било коју тачку решетке, већ на решетку као целину. Симетрија кристала је у директној зависности од унутрашње структуре, тј. одређена је расподелом честица у простој (елементарној) решетки. Од свих врста симетрија у кристалима се може формирати укупно 230 просторних група симетрије. Све кристалне структуре, без обзира на бројеве класа и група симетрије су смештене у 7 кристалографских система, који се међусобно разликују по особинама (врсти) елементарне ћелије, њеним параметрима и избору координатних оса: трициклични, моноциклични, орторомбични, тетрагонални, тригонални (ромбедарски), хексагонални и кубни.

Кристална фамилија	Бравеова решетка			
	примитивна	базно центрирана	запремнски центрирана	површински центрирана
Трициклична				
Моноклинична				
Орторомбична				
Тетрагонална				
Тригонална (ромбоедарска)				
Хексагонална				
Кубна				
				дијамантска

Слика 1.3. Подела кристала према врсти елементарне ћелије.

Пошто се у овој дисертацији разматра проблем кретања позитивних јона кроз кубне кристале, само ће они бити детаљније описани. Кубни (изометрични) кристални систем има јединичну ћелију облика коцке [5]. То је један од најчешћих и најједноставнијих облика међу кристалима.

Постоје четири главне врсте кубних кристала:

1. Примитивна кубна решетка:

Примитивна кубна решетка има по један чвор решетке у сваком темену коцке. Сваки атом у чвору решетке се дели између 8 суседних коцки (суседних решетки), а свака примитивна ћелија садржи укупно један атом. Ова кубна ћелија има најмањи атомски фактор паковања (број атома у јединици запремине) и веома је ретка у природи. Може се наћи као једињење ($NaCl$), а као један елемент јавља се само у случају атома полонијума Po^{84} (веома радиоактиван метал који нема стабилних изотопа).

2. Запремински центрирана кубна решетка (BCC):

Запреминска ћелија садржи 1 атом у центру коцке као и 8 атома у теменима коцке. Дакле, атомском фактору паковања одговарају 2 атома по примитивној ћелији.

3. Површински центрирана кубна решетка (FCC):

Површинска ћелија садржи поред 8 атома у теменима коцке и по 1 атом на средини свих 6 страница коцке. Њеном атомском фактору паковања одговарају 4 атома по примитивној ћелији.

4. Дијамантска кубна решетка:

Дијамантска ћелија има најгушћи атомски фактор паковања. Она поред 8 атома у теменима коцке, садржи 6 атома на срединама сваке странице коцке и 4 атома унутар коцке са координатама $(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}; \frac{1}{4}, \frac{3}{4}, \frac{3}{4}; \frac{3}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}; \frac{3}{4}, \frac{3}{4}, \frac{1}{4})$ у односу на референтну тачку која се налази у темену коцке. То значи да свака дијамантска кубна решетка садржи 8 атома.

1.2. Физичка својства кристала

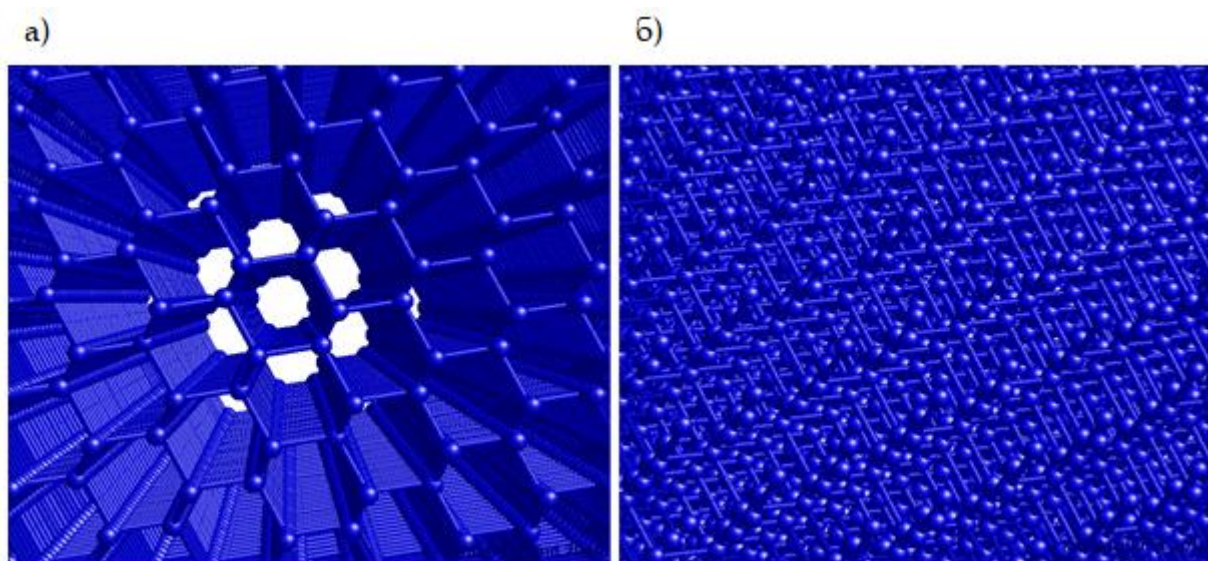
Стабилност кристала и њихово уређење указују на то да се честице које га граде налазе у позицијама стабилне равнотеже [6], тј. да између сила привлачења које теже да задрже честице на окупу и сила одбијања које се супротстављају томе постоји равнотежа. Природа ових сила је електрична (Кулонова) и као таква зависи од просторне расподеле густине наелектрисања. Између разноимених наелектрисања (електрона и језгра) делује привлачна сила, а између истоимених наелектрисања (електрона и електрона, језгра и језгра) делује одбојна сила. На растојањима већим од константе решетке доминантне су привлачне силе, док су на растојањима мањим од константе решетке доминантне одбојне силе. Због сложене структуре атома електрична сила која влада између атома кристала неће бити једноставно једнака Кулоновој сили која влада између тачкастих наелектрисања. Да би се прецизно одредила сила која влада између атома у обзир се мора узети екранизовање њихових језгара од стране електронског омотача. Постојање минимума потенцијалне енергије, тј. одбојну компоненту силе није могуће у принципу описати полазећи од класичне физике. Квантно - механичко описивање интеракције парова атома описује горе поменуто стабилност атома у кристалу, али је детаљно описивање овог процеса ван предмета ове дисертације [7].

Сила којом интерагују атоми кристала је једнака градијенту потенцијала интеракције $\vec{F} = -\nabla U(\vec{r})$, где је $\vec{r}$ растојање између њих. Потенцијал интеракције је физичка величина која описује интеракцију између пара атома или једног атома са групом атома. Овај потенцијал, као и сила између изграђивачких честица у кристалу мора имати и одбојну и привлачну компоненту да би се атоми кристала налазили у положају стабилне равнотеже. Место минимума потенцијалне јаме одређује растојање између два суседна атома. Такође познавањем потенцијала интеракције, може да се опише и интеракција других атома са атомима који сачињавају кристал, као што је то на пример у случају анализе материјала јонским сноповима, о чему ће бити више речи у овој дисертацији [8].

1.3. Каналисање наелектрисаних честица у кристалу

Каналисање је процес кретања наелектрисаних честица кроз кристална тела дуж одређених кристалографских праваца [9]. Каналисање наелектрисаних честица

се не може јавити када се чврсто аморфно тело, које има случајно оријентисане везе међу атомима, изложи снопу наелектрисаних честица. У том случају долази до еластичног и нееластичног расејања честица упадног снопа на аморфном материјалу, тј. на његовим насумично распоређеним атомима. Расподела честица упадног снопа кроз аморфни материјал ће имати Гаусову расподелу. Међутим, када је упадни снап усмерен дуж једног од главних кристалографских правца кристала уочава се зависност расподеле наелектрисаних честица од оријентације упадног снопа у односу на кристалну решетку. Појам каналисања се односи на кретање наелектрисаних честица кроз осне или раванске канале кристала. У овим случајевима ефекат кретања наелектрисаних честица се назива аксијално или раванско каналисање, респективно.



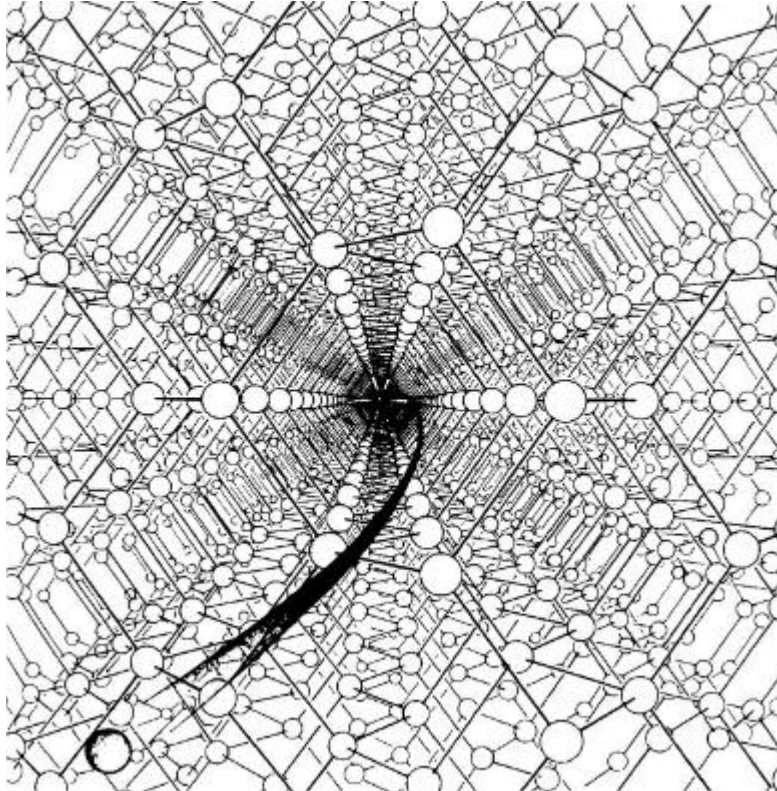
Слика 1.4. Изглед кристала силицијума дебљине око 12 nm у зависности од оријентације: а) оријентисан дуж (011) правца, б) случајна оријентација.

Током каналисања угао између вектора импулса, односно брзине наелектрисане честице и осе канала, или медијалне равни остаје мали [9]. Ово је резултат малих узастопних (повезаних) расејања на атомима који образују канал или раван кристала и при чему долази до квази - осцилаторног кретања каналисаних честица. У овом случају допринос од процеса расејања са малим ударним параметрима између наелектрисане честице и атома кристала је веома мали. Касније, у тексту ове дисертације, ће бити показано да се у случају каналисања јона кроз врло танак кристал може јавити ефекат дуге [10].

1.4. Увод у тематику дисертације

У овој дисертацији је обрађена тема кристалних дуга које се јављају при каналисању позитивних јона водоника – протона кроз канале кубних кристала и примена овог ефекта за одређивање потенцијала интеракције између каналисаних јона и кристала. Кретање наелектрисаних честица дуж таквих праваца, тј. кроз отворене канале кристала је одређено кохерентним расејањем (више узастопних повезаних расејања) честица на атомским низовима или равнима, а не индивидуалним расејањем на појединачним атомима.

Ефекат каналисања је откривен раних 60-их година прошлог века, иако је много раније, 1912. године Штарк [11] предвидео ову појаву, што је описао на следећи начин: *у случају кристалне структуре, електромагнетно осетљиве честице ће моћи да продру много већу дебљину дуж главних оса него у случају аморфних тела... Према томе у кристалима, не само апсорпција већ и процеси расејања честица упадног зрачења ће се другачије одвијати по различитим осама или равнима. Међутим, у то доба, због великог интересовања за пручавање интеракција електрона и тада тек откривених рентгенских зрака са кристалима, овај ефекат је остао у њиховој сенци.*



Слика 1.5. Уметнички концепт процеса каналисања на микроскопској скали.

На закаснелу потврду ефекта каналисања се чекало до 60-их година прошлог века. Овај ефекат су први потврдили 1960. године Дејвис и сарадници [12]. Они су приметили неочекивано велике дубине продирања тешких јона KeV -ских енергија у кристалима алуминијума Al^{13} и волфрама W^{74} . Недуго затим, 1963. године, Робинсон и Оен [13] су извршили рачунарску симулацију заустављања јона бакра Cu^{29} енергија $1 - 10 KeV$ -а у различитим кристалима и несумњиво потврдили повећање дубине продирања јона бакра Cu^{29} у случају када се правац јонског снопа поклапао са кристалографским осама кристала мете. Теоријско објашњење ове појаве ускоро је дао Линдхард [14] чији је рад био основа за будуће радове на ову тему. Први детаљан рад који се бавио ефектом каналисања наелектрисаних честица са свеобухватним прегледом теорије, експерименталног истраживања и неким применама овог ефекта објавио је Гемел 1974. године [9].

Значајан ефекат у каналисању, тј. трансмисији јона кроз канале веома танког кристала је ефекат кристалне дуге, који је предвидео Нешковић [10], а касније су овај ефекат измерили Краус и сарадници 1986. године [15]. Поред основне Линдхардове теорије каналисања, Петровић и сарадници [16] су формулисали теорију кристалних дуга која тачно предвиђа просторне и угаоне расподеле каналисаних

јона за дебље кристале, што Нешковићев модел није био у могућности да уради. Иначе, назив кристална дуга је усвојен због аналогије са метеоролошком дугом.

1.5. Оптичка (метеоролошка) дуга

Дуга је метеоролошка (оптичка) појава која се најчешће јавља на небу у виду траке кружног облика која се састоји од серије концентричних обојених лукова следећег редоследа: црвена, наранџаста, жута, зелена, плава, индиго и љубичаста [17]. Овај природни феномен забележен због своје лепоте и мистичног изгледа сматран је специјалним и био је омиљена компонента уметности и религије током људске историје, али и науке. Још у античко доба учени људи су покушали да објасне овај феномен са научног аспекта, за разлику од митолошког/религијског објашњења.

Да бисмо видели дугу, потребан је извор светлости, у случају метеоролошке дуге то је Сунце и капљице воде, најчешће је то киша, иако се дуга може приметити где год има ситних капљица воде у ваздуху. Дуга је ређа појава него што би се могло помислити, нпр. на било ком месту у кишовитој Енглеској има мање од 10 јасних дуга у години. Метеоролошку дугу је могуће видети само у смеру супротном Сунцу, када се светлосни зраци Сунца одбију од капљица кише у очи посматрача, тј. посматрач мора бити окренут леђима Сунцу [18]. Да би се дуга веома јасно видела потребно је да Сунце буде што ниже на хоризонту и да густина кишних капи буде што интензивнија. Као што је већ напоменуто, дуга се на небу види као полукружни лук, а угао под којим посматрач види дугу износи око 41 степен.

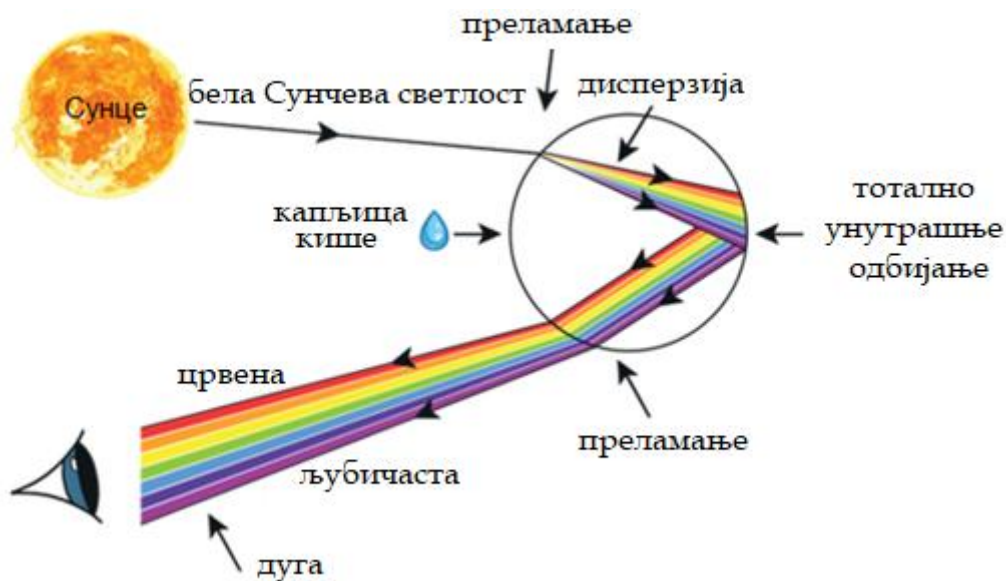


Слика 1.6. Позиција метеоролошке дуге у односу на посматрача и Сунце.

У ретким случајевима када је посматрач на великој надморској висини, или у авиону, могуће је да он види више од пола кружнице дуге. Светлосни зраци који сачињавају дугу тада формирају конус чији је врх у оку посматрача, а оса му је паралелна са зрацима Сунца и усмерена ка антисоларној тачки. Дуга је заправо колекција Сунчевих зрака под одређеним углом. Јасно је да она не одговара ниједној одређеној тачки у простору, већ сваки посматрач види своју дугу са другачијим конусом.

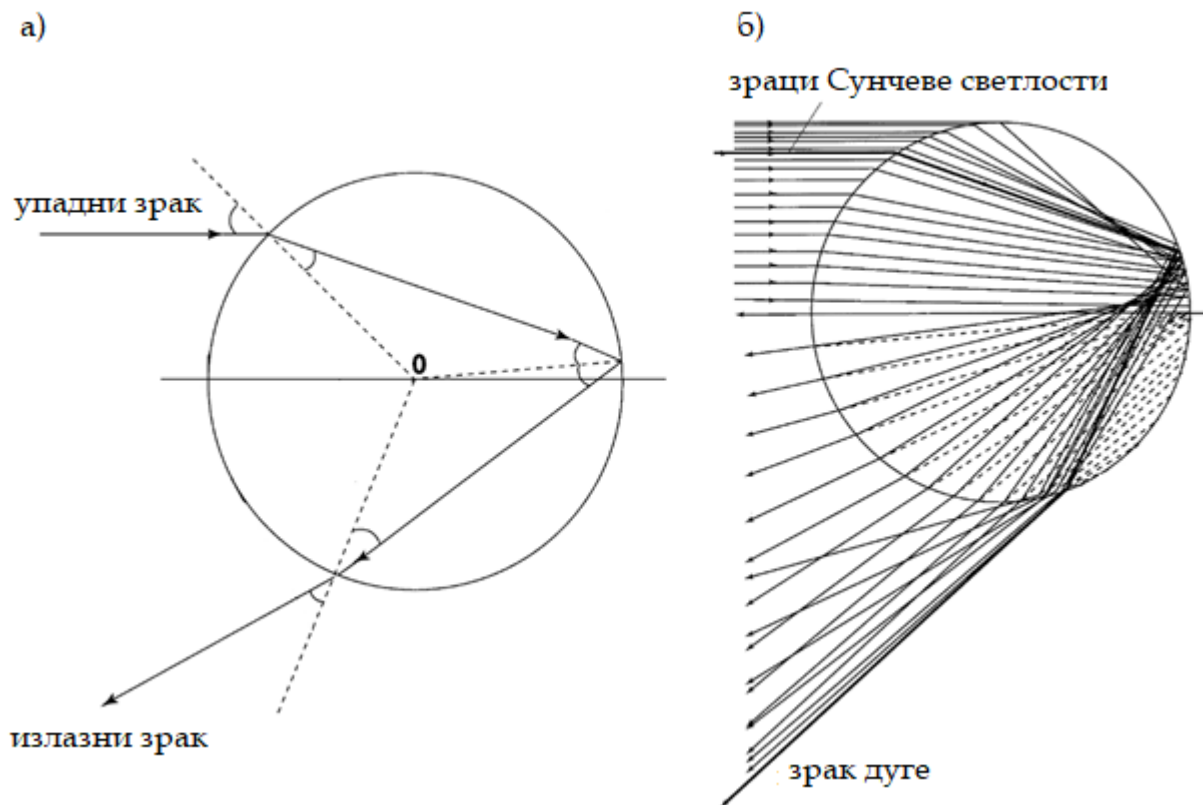
Црвена боја је увек најудаљенија боја дугиног лука у односу на антисоларну тачку, док је боја унутрашњег лука љубичаста. То значи да је дугин лук љубичасте боје мало испод 40 степени, док је црвени лук на 42 степена, а између су лукови осталих боја. Овај редослед обојених лукова дуге се јавља као последица дисперзије беле Сунчеве светлости на капљицама воде, при чему се боје различите таласне дужине преламају за различит угао, тако да се и лукови различитих боја виде под различитим углом.

Пролазак Сунчеве светлости кроз капљице кише која ствара ефекат дуге се одвија следећим током. Сунчева светлост улази у капљицу воде при чему доживљава преламање и дисперзију, након чега се одбија на задњој страни капљице и на крају, доживљава још једно преламање при изласку из капљице воде. Ово је приказано на слици 1.7 [18].



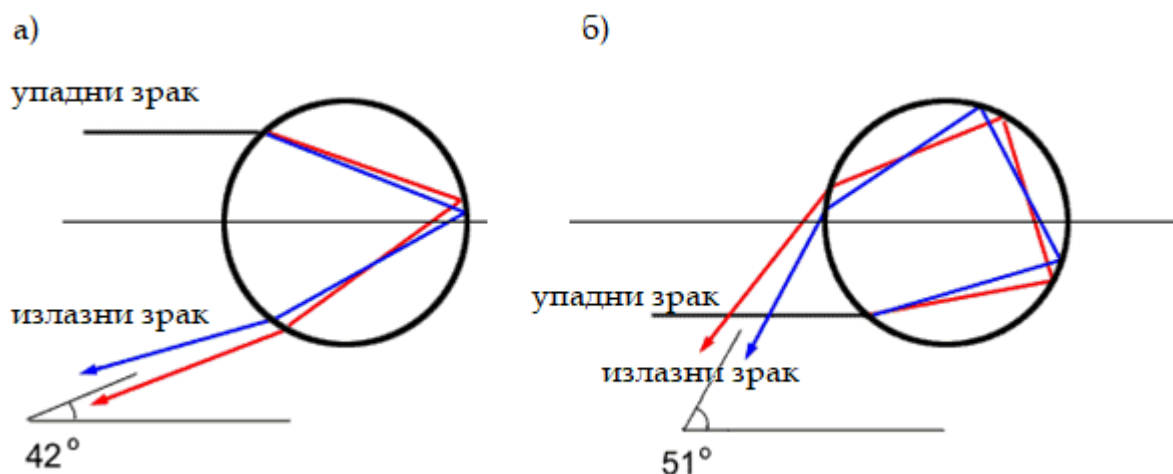
Слика 1.7. Процес проласка Сунчеве светлости кроз капљицу кише и формирање дуге.

Већи део упадне Сунчеве светлости ће се због геометрије овог процеса одбити у излазни угао вредности дугиног угла, па ће на тој вредности доћи до појачања интензитета излазне светлости [18]. Током овог процеса долази до фокусирања светлости дуж дугиних углова. Због овог фокусирања је и могуће видети дугу на небу знатно светлију од позадинског осветљења. Ово фокусирање је приказано на слици 1.8.



Слика 1.8. а) Путања светлости кроз капљицу кише и б) њено фокусирање у дугин угао.

Светлосни зраци који доживе два унутрашња одбијања образују секундарну дугу која је мање светла од примарне и има радијус од 51 степен – лежи 9 степени изнад примарне на небу [18]. Како је одбојни угао секундарне дуге 231 степен у односу на улазни правац, јасно је да она потиче од Сунчевих зрака који уђу у доњу половину сферне капљице, док примарна потиче од Сунчевих зрака који уђу у горњу половину капљице.



Слика 1.9. Геометрија формирања: а) примарне дуге и б) секундарне дуге.

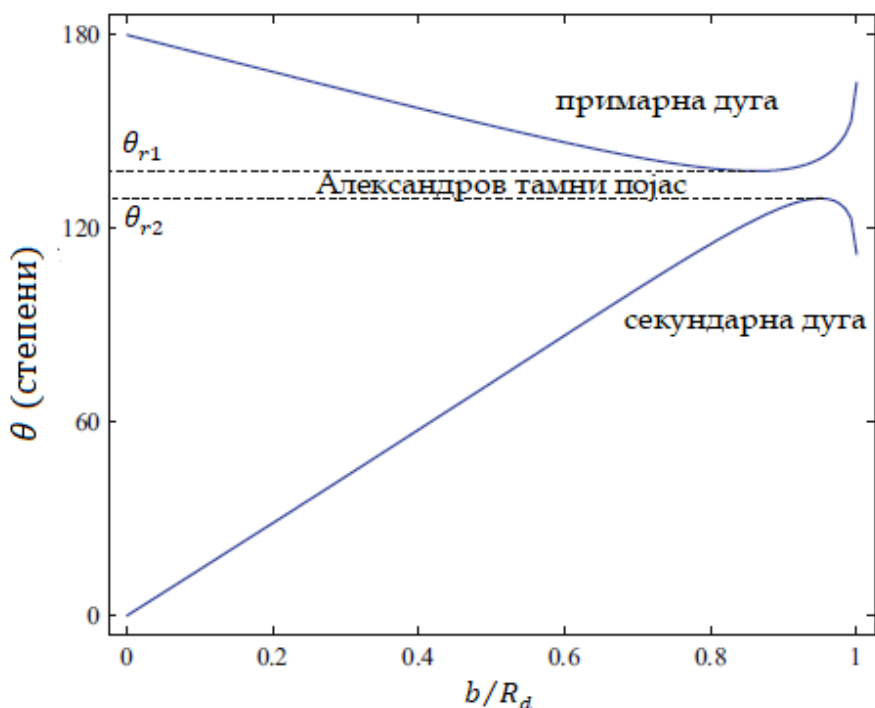
Пошто је секундарна дуга обрнута у односу на примарну и редослед боја јој је обрнут, тако да су светла и тамна страна секундарне дуге такође обрнуте у односу

на примарну дугу [18]. Зраци секундарне се одбијају у излазне углове од 231° степен, а небо испод ње је тамно. Због тога ће област између примарне и секундарне дуге бити тамна, а зове се Александров тамни појас.



Слика 1.10. Примарна и секундарна дуга и Александров тамни појас између.

На слици 1.11 приказана је зависност излазног угла упадне светлости из капљице кише у односу на упадни ударни параметар светлости за примарну и секундарну дугу, која се назива функција дефлексије. За примарну дугу ова зависност има минимум на вредности $\theta_{r1} = 138^\circ$ док секундарна има максимум на $\theta_{r2} = 130^\circ$. Пошто је расподела упадних ударних параметара униформна, релативно велики опсег ударних параметара се пресликава у релативно мали опсег излазног угла у близини дугиних углова. Као резултат тога расејана светлост се акумулира на вредностима примарног и секундарног дугиног угла.



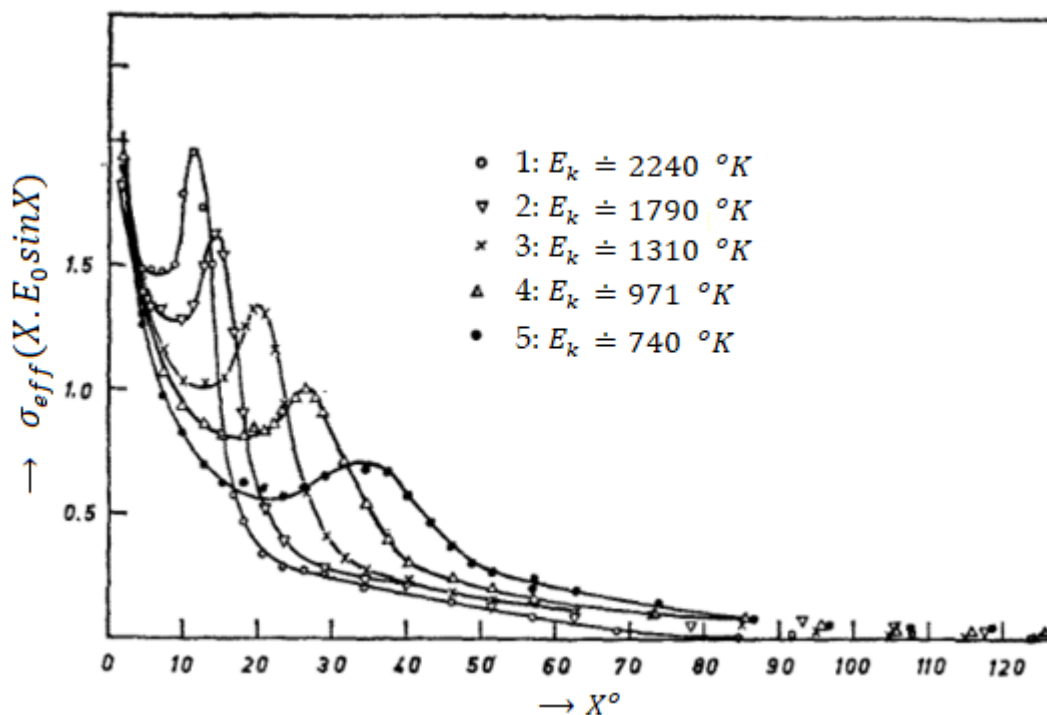
Слика 1.11. Функције дефлексије за примарну и секундарну дугу.

Што се тиче дуга вишег реда, оне нису видљиве голим оком на небу зато што је њихов интензитет знатно мањи у односу на примарну и секундарну, као и у односу на позадинско Сунчево осветљење. Поред тога њихов угао фокусирања је већи у односу на примарну и секундарну дугу тако да је и фокусирање светлосних зрака мање. Такође, трећа и четврта дуга се јављају у смеру ка Сунцу, због чега су додатно заслепљене Сунчевом светлости. Детаљна теорија метеоролошке дуге може се наћи у раду Нусензвајга [18].

1.6. Честичне дуге

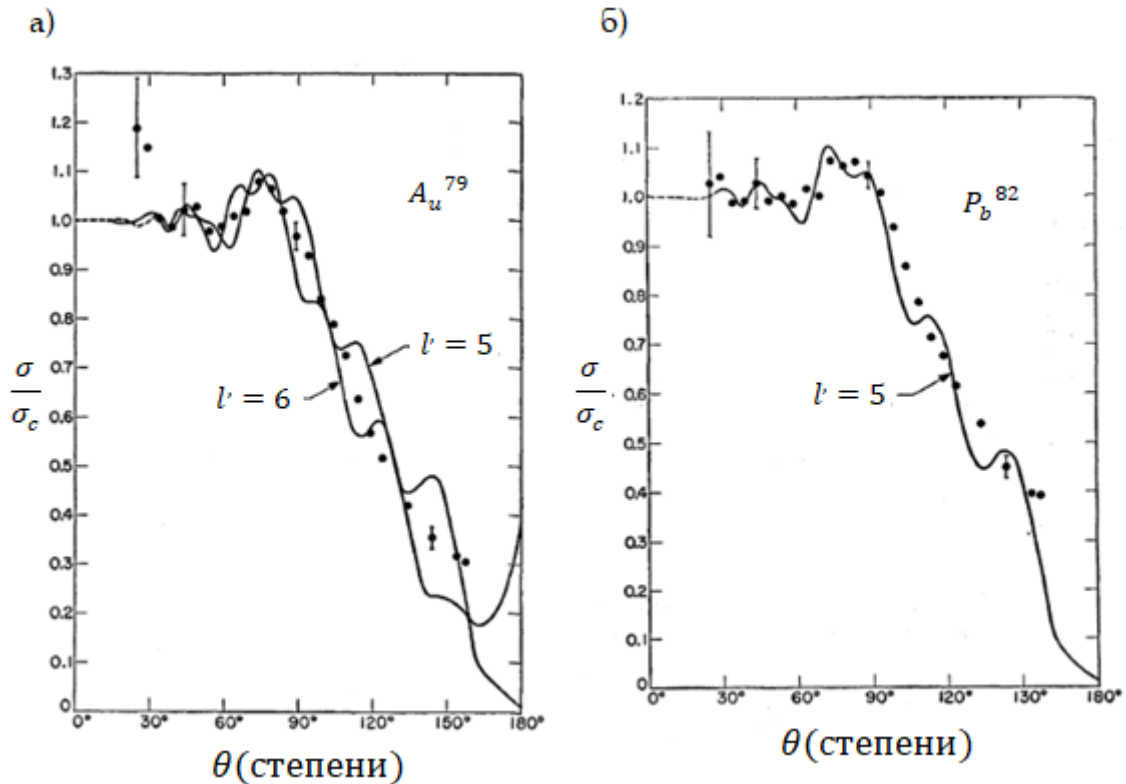
Поред метеоролошких (оптичких - фотони) постоје и честичне дуге. Иако су по таласно - честичном дуализму фотони честице, у овом случају назив честичне дуге се односи на наелектрисане честице. Дуга код наелектрисаних честица има особине које су аналогне са оптичким дугама, па је зато и добила такво име.

Прве честичне - атомске дуге је открио Фирсов 1953. године, у процесу еластичног расејања јона на атомима [19]. Он је извршио детаљну класичну анализу процеса еластичног расејања јона на атомима и приметио да функција дефлексије има минимум на одређеној вредности, а да диференцијални ефикасни пресек за расејање σ у тој тачки тежи бесконачности. Јасно је да је овакво понашање функције дефлексије и диференцијалног ефикасног пресека за расејање аналогно понашању интензитета расејане светлости кроз капљицу кише на вредности дугиног угла. Овај ефекат је неколико година касније и експериментално измерен при одређивању диференцијалног ефикасног пресека за расејање у сударима снопова атома калијума K^{19} са снопом племенитог гаса криптона Kr^{36} и водоник - бромида HBr [20]. Сноп калијума K^{19} је укрштан под правим углом са снопом криптона Kr^{36} и водоник - бромида HBr , а угаоно покретни јонизујући детектор је мерио допринос расејаних јона калијума K^{19} у зависности од угла расејања θ . Добијени резултати су јасно указивали на нелинеарно понашање диференцијалног ефикасног пресека за расејање σ у околини дугиног угла као и на то да диференцијални ефикасни пресек за расејање у околини дугиног угла има јасно изражен пик, што је повезано са ефектом фокусирања светлости у околини дугиног угла. Ова особина је илустрована на слици 1.12 одакле се може видети да диференцијални ефикасни пресек за расејање има изражене пикове на вредностима дугиног угла. Угаона позиција пикова, тј. угаона позиција угла дуге зависи од енергије упадних јона калијума K^{19} и повећава се са смањењем енергије.



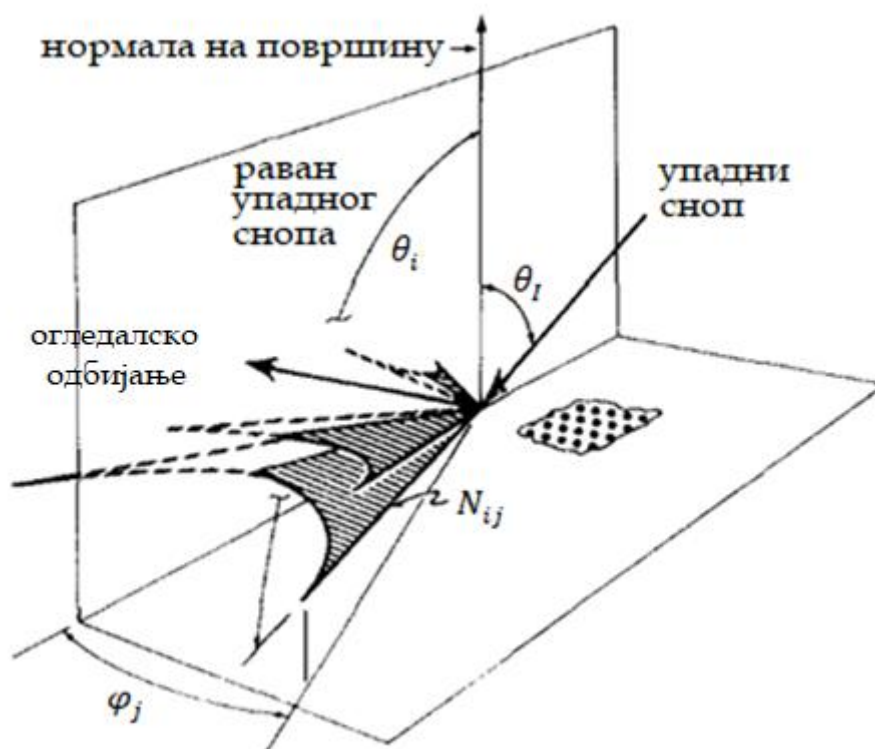
Слика 1.12. Експериментални резултат расејања $K - HBr$. Диференцијални ефикасни пресек за расејање помножен са $\sin\theta$ у зависности од угла дефлексије θ за различите енергије упадног снопа калијума K^{19} .

Након потврде атомских дуга дошло је до првог експерименталног доказа нуклеарних дуга у експериментима еластичног расејања алфа честица He^{2+} на танким фолијама сребра Ag^{47} , злата Au^{79} и олова Pb^{82} [21]. Мерењем интензитета расејаних алфа честица у функцији од угла расејања утврђено је да диференцијални ефикасни пресек за расејање одговара Радерфордовој једначини за расејане углове у смеру кретања алфа честица, али да под неким одређеним углом долази до одступања од ове једначине, тј. јављају се изражени пикови измерених интензитета, а њихове позиције одговарају позицијама дугиних углова. Позиције пикова у диференцијалном ефикасном пресеку за расејање су приказане на слици 1.13.



Слика 1.13. а) Расејање алфа честица на танким фолијама злата Au^{79} и б) олова Pb^{82} и измерени пресеци за расејање. Тачке су експериментални подаци, а линије теоријски.

Поред атомских и нуклеарних дуга откривене су и површинске дуге у експериментима еластичног расејања снопа атома на површинама кристала одређене оријентације, тј. дуж одређених кристалографских праваца [22]. И у овим мерењима је примећено знатно одступање интензитета расејаних атома у зависности од угла расејања - јавили су се пикови на вредностима угла расејања који одговарају дугином углу. У случају површинских дуга, где се расејање атома дешава на површинама кристала одређене оријентације са уређеном симетричном кристалном структуром, ови пикови се јављају симетрично са обе стране угла огледалске рефлексије. Разлика угла огледалског расејања и угла позиције левог или десног пика одговара дугином углу. Ово је приказано на слици 1.14.

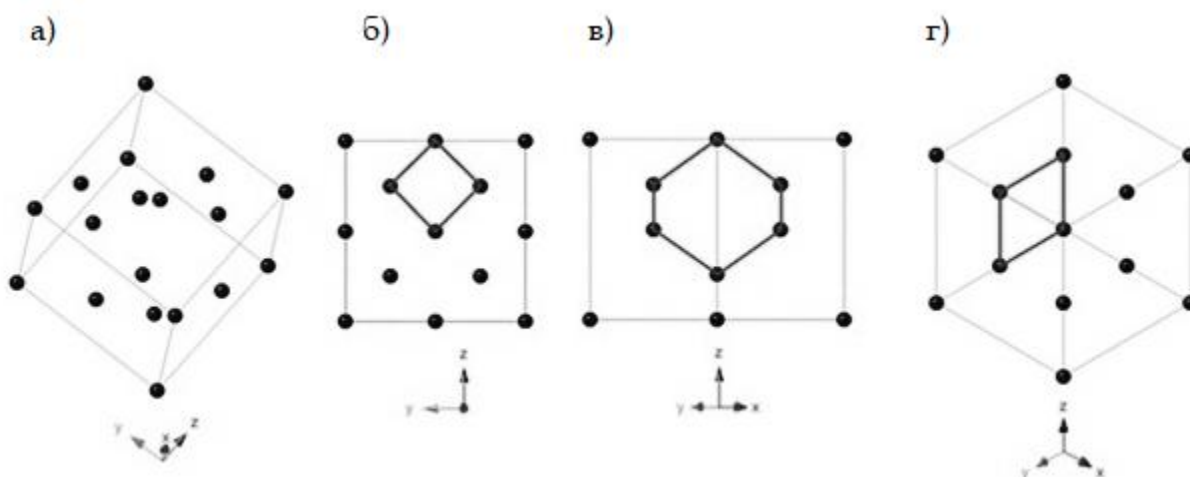


Слика 1.14. Скица дугиног расејања на површини запремински центрираног кубног кристала оријентације (001).

Ефекат дуге при каналисању јона кроз врло танак кристал први је показао Нешковић [10]. Ове дуге се називају кристалне дуге. Угаона расподела каналисаних јона, тј. расподела углова отклона у односу на почетни правац кретања има изражене максимуме на вредностима дугиног угла. Овај ефекат је након предвиђања показан у експериментима каналисања протона кроз веома танке кристале силицијума Si^{14} [15]. Теоријска могућност постојања дуга у каналисању позитрона као и протона кроз наноцеви и графен показана је недавно [23 -25].

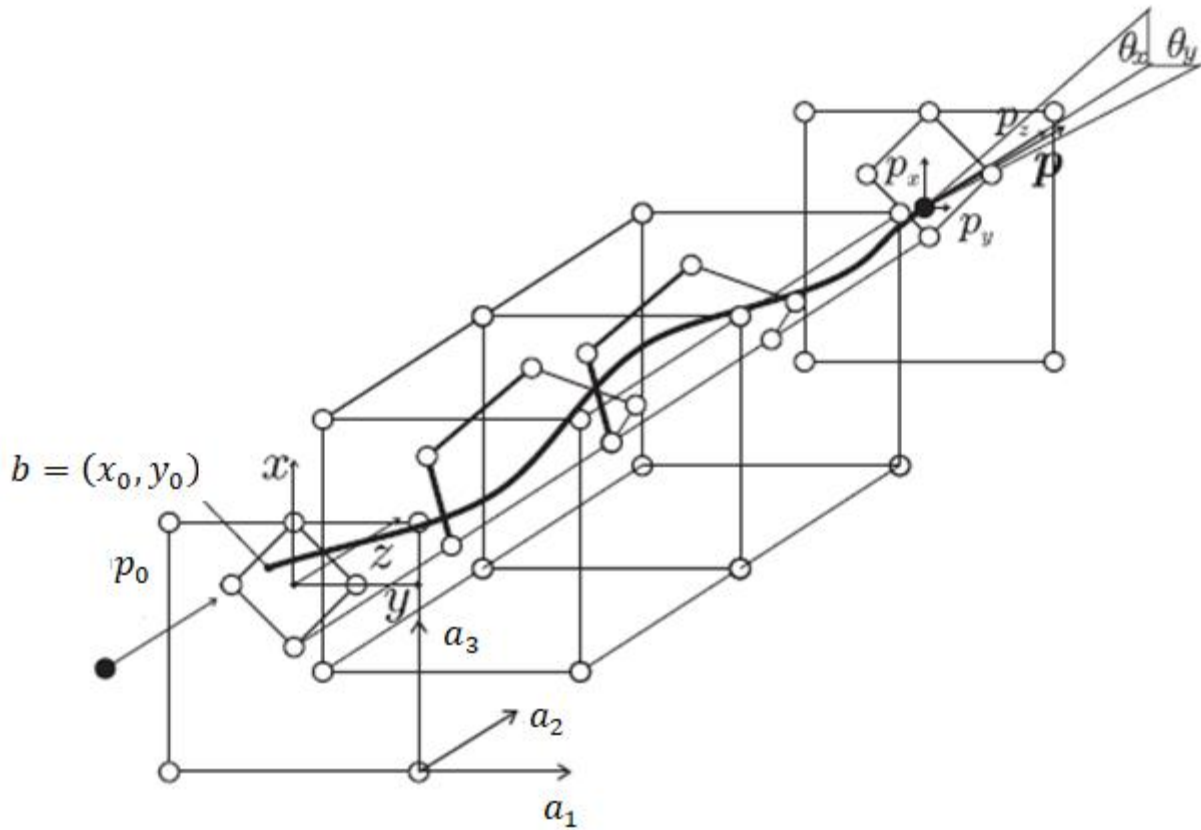
2. ОСНОВИ ТЕОРИЈЕ КАНАЛИСАЊА ЈОНА КРОЗ КРИСТАЛ

При интеракцији снопа позитивно наелектрисаних честица (у даљем тексту јона, где се у дисертацији подразумева да је јон позитивно наелектрисан) и чврстог тела могу се десити следећи физички феномени: еластично и нееластично расејање јона, Радерфордово повратно расејање, емисија секундарних електрона, емисија фотона и нуклеарне реакције [9]. При интеракцији јона и кристала, распоред и оријентација атома кристалне решетке у односу на правац упадног снопа утиче на вероватноћу поменутих интеракција. Као што је већ напоменуто, утицај кристалне решетке на трајекторије наелектрисаних честица које продиру у кристал познат је као ефекат каналисања.



Слика 2.1. Изглед канала кристала силицијума Si^{14} у зависности од његове оријентације: а) случајна, б) (100), в) (110) и г) (111) оријентација.

Шематски приказ каналисања је дат на слици 2.2: јон који интерагује са кристалом заклапа одређени упадни угао, вредности од 0 степени до неке максималне вредности (мање од критичног угла за каналисање) са осом канала - у овом случају осом квадратног канала (001) кристала дијамантске кристалне решетке. Кретање јона се описује у декартовом координатном систему, x, y, z - осе, које су изабране тако је z оса лонгитудинална која одговара правцу кретања јона и поклапа се са осом канала, док x и y - осе образују раван нормалну на лонгитудинални правац, тј. трансверзалну раван.



Слика 2.2. Кретање јона кроз квадратни канал кристала силицијума Si^{14} .

Почетне позиције јона на улазној равни у кристал $z = 0$, су $b(y_0, x_0)$ и изабране су униформно дуж трансверзалне равни кристала. Позиције атома који образују канал кристала у овој оријентацији су (y_1, x_1) , $(-y_1, x_1)$, $(y_1, -x_1)$ и $(-y_1, -x_1)$, тако да је $-y_1 < y_0 < y_1$ и $-x_1 < x_0 < x_1$. На овај услов могућих почетних позиција се додаје и услов најмањег растојања на које каналисани јон сме да приђе атомском низу, који је већи од радијуса екранирања, пошто би тада упадни јон доживео расејање на атому кристала при чему би угао расејања био већи од критичног за каналисање [14]. При оваквим почетним условима, вероватноћа за све физичке процесе који захтевају сударе са малим растојањем јона и атома је знатно редукована [9]. Након уласка у канал кристала, позитивни јон доживљава велики број повезаних расејања под малим углом на атомским низовима који образују канал услед дејства екранизоване одбојне електричне Кулонове силе и успоставља му се квази - осцилаторно кретање око осе канала. Даљим кретањем кроз канал јон долази до излазне равни кристала, при чему је једначина кретања јона кроз канал одређена потенцијалом интеракције, што је описано Њутновим једначинама кретања:

$$d\vec{p}/dt = -\nabla U_{ch}(\vec{\rho}) \quad 2.1$$

где је t време, $\vec{p}$ импулс јона, U_{ch} потенцијал интеракције јон - канал (кристал), а $\vec{\rho}$ трансверзални вектор позиције јона [26]. Након изласка из кристала јон је расејан под углом $\theta = (\theta_x, \theta_y)$ у односу на осу канала. Излазни углови расејаних јона су мали (мањи од критичног угла за каналисање). Расејање јона се дешава услед одбојних судара позитивних јона и атома кристала, при чему јон интерагује са атомом као целином, тј. атомским језгром екранизованим електронским облаком око њега. У

случају танких кристала који су анализирани у овој дисертацији у процесу каналисања занемарају се енергијски губици јона односно узима се у обзир да су судари еластични.

Све почетне позиције јона образују почетну раван ударног параметра, док све крајње позиције јона образују раван која се назива крајња раван ударног параметра, а сви излазни углови образују раван која се назива раван угла расејања [10]. Једноставно објашњено, раван ударног параметра се поклапа са трансверзалном равни кристала, док се раван излазних углова састоји од свих излазних углова каналисаних честица. Дефинисање ових равни је битно у описивању пресликавања каналисаних јона из почетних позиција у крајње позиције и из почетних позиција у излазне углове. Модел и теорија кристалних дуга се заснивају на овим пресликавањима.

2.1. Примена класичне механике

Процес каналисања се може описати применом класичне нерелативистичке механике, под условом да је маса каналисане честице реда протона или већа и да јој је брзина знатно мања од брзине светлости [14]. За судар два огољена језгра (без електрона) маса m_1 и m_2 , наелектрисања Z_1 и Z_2 , са условом $m_2 \gg m_1$, се узима да честица мете мирује, а релативистички ефекти су игнорисани. У оваквом систему неодређеност угла расејања има два доприноса: услед неодређености позиције пројектила и услед дифракције. Услед ова два доприноса Бор је показао да је услов за примену класичне механике $(2 Z_1 Z_2 e^2)/(\hbar v) \gg 1$ [27], из којег се директно види да постоји одређена горња граница кинетичке енергије пројектила изнад које класична механика није употребљива. Међутим, Линдхард [14] је показао да у случају каналисања, где долази до повезаних расејања под малим углом, за разлику од индивидуалних расејања под малим углом, ситуација постаје другачија. Ако претпоставимо постојање атомског низа у формирању канала кристала, неодређеност угла расејања у случају малих повезаних расејања протона на атомском низу не расте са сваким следећим расејањем и потреба за употребом квантне механике опада са порастом кинетичке енергије пројектила. За континуални низ дошао је до услова за примену класичне механике:

$$2[(Z_1 Z_2 m_1 a_s^2)/(m_e d a_0)]^{1/2} \gg 1 \quad 2.2$$

где је Z_1 наелектрисање пројектила, Z_2 наелектрисање мете, m_1 маса пројектила, a_s је радијус екранирања, m_e маса електрона, d растојање између атома у низу и a_0 Боров радијус; што је испуњено ако је $m_1 \gg m_e$. За протоне којима је маса реда 10^3 пута већа од масе електрона, овај услов је очигледно испуњен.

2.2. Потенцијал интеракције јона и кристала

За описивање интеракције каналисаног јона и атома кристала веома је важно познавати потенцијалну енергију њихове интеракције као функције њиховог растојања [9]. Велики број аналитичких потенцијала је до сада предложен у литератури, али су то углавном полуемпиријски изрази, у смислу да је аналитичка форма потенцијала претпостављена, а непознате константе су одређене тако да добро фитују експерименталне резултате.

При одређивању потенцијала интеракције из првих принципа, у идеалном случају, очекивало би се постављање и решавање Шредингерове једначине за овакав систем, али (као и у проблему много тела) овакав приступ је веома тешко решив, чак и за атоме који имају само неколико електрона.

Друга решења, се најчешће заснивају на Томас - Ферми статистичкој теорији атома [9]. У оригиналној Томас - Ферми теорији за атом се претпоставља да електрони формирају потпуно дегенерисан сферно симетричан гас око језгра. Пошто је овај модел статистички његова прецизност се повећава са повећањем атомског броја. Наравно Томас - Ферми модел је апроксимација стварног модела атома, али је много прилагодљивији за употребу него решавање Шредингерове једначине.

Дакле, у теорији каналисања се ради једноставности процеса расејања најчешће употребљава Томас - Ферми статистички модел атома [9]. Претпоставља се да се процес појединачног расејања јона на атомима кристала у сваком тренутку може адекватно представити као двочестични проблем, на основу тога се за потенцијал интеракције $V(r)$ претпоставља да је двочестична функција која зависи од међусобног растојања. Уз ове претпоставке потенцијал интеракције се може написати као:

$$V(r) = (Z_1 Z_2 e^2 / r) \phi(r/a_s) \quad 2.3$$

где $\phi(r/a_s)$ представља функцију екранирања језгара двочестичног расејања Томас - Ферми типа, а a_s је радијус екранирања који има другачију вредност за сваки пар сударних партнера (зависи од Z_1 и Z_2). У идеалном случају оваква функција екранирања добро скалира Кулонов потенцијал на свим растојањима, тако да за врло велика растојања тежи нули, а за мала растојања (Боров радијус) тежи јединици. Захваљујући тој особини, приликом описивања сударних процеса у каналисању могу се користити само екраниране функције типа (2.3) за јон - атомски потенцијал интеракције. Лоша особина Томас - Ферми модела атома је то што не узима у обзир детаљну структуру електронских љуски атома кристала, али ипак, са друге стране довољно добро репродукује резултате каналисања. У опсегу брзина (енергија) јона који се проучавају у овој дисертацији, потенцијал интеракције јона и атома кристала је доста добро описан као сферно симетричан, односно јон при овим брзинама „види“ атоме као сферно симетричне постављене у чворовима решетке у првој апроксимацији.

Тачне вредности Томас - Ферми функције екранирања се могу добити нумерички, али постоје и разни приближни аналитички изрази. Један од најпознатијих је Молијерова апроксимација [28], која је веома често коришћена у разматрању атомских судара у чврстим телима:

$$\phi_M(r/a_{TF}) = \sum_{i=1}^3 \alpha_i \exp(-\beta_i r/a_{TF}) \quad 2.4$$

где су $\alpha_i = (0.10, 0.55, 0.35)$ и $\beta_i = (6.0, 1.2, 0.3)$ параметри фитовања, при чему је $a_{TF} = (9\pi^3/128)^{1/3} Z_2^{-1/3} a_0$, Томас - Ферми радијус екранирања, Z_2 је атомски број атома мете, $a_0 = \hbar^2/m_e e^2 = 0.0529 \text{ nm}$ Боров радијус, m_e је маса електрона, а $\hbar$ редукована Планкова константа. Треба напоменути да Томас - Ферми радијус атома не укључује ефекат интеракције са пројектилом.

Линдхард [14] је предложио другу апроксимацију Томас - Ферми функције екранирања, која је често коришћена у процесима каналисања јона, али се касније показало да није довољно прецизна:

$$\varphi_L(r/a_L) = 1 - 1/[1 + C_L(r/a_L)^{-2}]^{1/2} \quad 2.5$$

где је C_L параметар фитовања чија је стандардна вредност 3, а радијус екранирања је $a_L = (9\pi^3/128)^{1/3}(Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{-1/2}a_0$; Z_1 је атомски број пројектила.

Поред тога Зиглер, Бирзак и Литмарк су увели тзв. универзални ZBL потенцијал интеракције са функцијом екранирања заснованом на Хартри - Фок моделу [29]. Они су ову функцију добили из нумеричке анализе 261. атомског пара и овако добијена функција се највише користи у разматрању атомских судара:

$$\varphi_{ZBL}(r/a_{ZBL}) = \sum_{i=1}^4 \gamma_i \exp(-\delta_i r/a_{ZBL}) \quad 2.6$$

где су $\gamma_i = (0.1818, 0.5099, 0.2802, 0.02817)$ и $\delta_i = (3.2, 0.9423, 0.4028, 0.2016)$, параметри фитовања, а радијус екранирања има следећи облик: $a_{ZBL} = (9\pi^3/128)^{1/3}(Z_1^{0.23} + Z_2^{0.23})^{-1}a_0$.

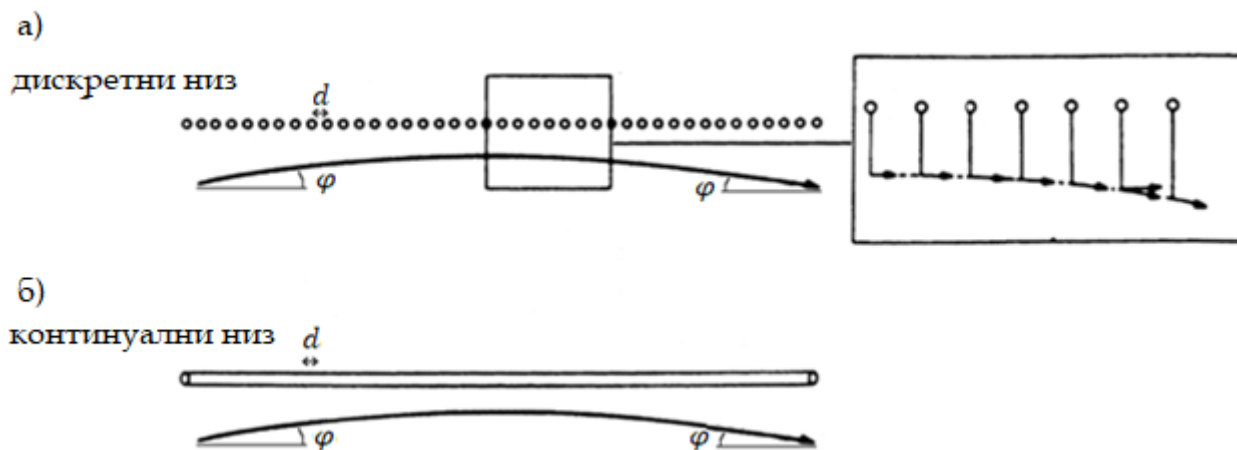
Фирсов је анализирајући утицај пројектила на потенцијал интеракције увео свој радијус екранирања дат на следећи начин: $a_F = (9\pi^3/128)^{1/3}(Z_1^{1/2} + Z_2^{1/2})^{-2/3}a_0$ [30]. Молијеров потенцијал интеракције са Фирсовим радијусом екранирања представља основу за испитивање разних јон - атом сударних процеса у овом раду. Он се добија тако што се Томас - Фермијев радијус екранирања скалира на Фирсов, при чему се мењају параметри фитовања $\beta_i'/a_F = \beta_i/a_{TF}$:

$$\varphi_M^F(r/a_F) \equiv \varphi_M(r/a_{TF}) = \sum_{i=1}^3 \alpha_i \exp(-\beta_i' r/a_F) \quad 2.7$$

где је нови $\beta_i' = (5.124, 1.025, 0.2562)$.

2.3. Континуални потенцијал интеракције

У случају каналисања, расејање јона захтева да јон буде довољно далеко од атома кристала тако да не дође до интеракција које захтевају мале ударне параметре, односно велике углове расејања [9]. Због тога је кључни фактор у каналисању тај да честица доживљава много повезаних расејања под малим углом. У атомском низу који чини аксијални канал, атоми су поређани дуж праве линије, по правилу на једнаком међусобном растојању d . Може изузетно да се деси да постоји више различитих низова атома који чине атомски низ, али се у том случају може одредити ефективно међусобно растојање између атома, које ћемо у даљем тескту такође обележавати са d . Линдхард је први у теорији каналисања увео појам континуалног уместо дискретног атомског низа [14], у ком се атоми не посматрају као да су у својим дискретним позицијама, већ су „размазани“ дуж целог атомског низа. Овакав модел атомског низа се зове континуална апроксимација атомског низа, а атомски низ се више не посматра као перла са атомима на растојању d , већ као танка „шипка“. Овакав континуални модел атомског низа је илустрован на слици 2.3.



Слика 2.3. а) Дискретни и б) континуални атомски низ; у правоугаонику је увеличан појединачни утицај сваког атома дискретног низа на трајекторију каналисаног јона.

За изолован атомски низ i се може извести континуални потенцијал интеракције, где потенцијал интеракције јона и низа i није више сума појединачних потенцијала интеракције јона и сваког атома низа посебно, $\bar{V}_i(r) = \sum V_j(r)$, већ је једнак интегралу:

$$U_i(\rho) = (1/d) \int_{-\infty}^{+\infty} V_i[(\rho^2 + z^2)^{1/2}] dz \quad 2.8$$

где је d растојање између атома у i -том атомском низу, ρ је нормално растојање јона од атомског низа, а z је лонгитудинална координата паралелна са атомским низом [9]. Потенцијал интеракције јона и кристала $U(\rho)$, је једнак суми потенцијала интеракције јона и атомских низова који чине канал, односно оних атомских низова који доприносе довољно тачном описивању кретања каналисаног јона. Овако дефинисан потенцијал интеракције је дводимензионалан.

2.4. Термалне вибрације атома

Одбојна екранизована Кулонова сила која делује између јона и језгара атома кристала одређује трајекторију каналисаног јона. Она, а самим тиме и потенцијал интеракције зависе од растојања, тј. ударног параметра и од наелектрисања сударних партнера и степена екранизовања. Додатни утицај на каналисани јон имају и термалне вибрације атома кристала који образују канал [9]. Као што је добро познато, атоми кристала на било којој температури (укључујући апсолутну нулу) осцилују око својих равнотежних положаја. На ниским температурама ова осциловања су хармонијска са малим амплитудама, али је и поред тога теорија осциловања атома кристала веома компликована, па се до експлицитних решења термалних вибрација атома кристала долази уз различите апроксимације и претпоставке које у конкретној ситуацији имају физичко оправдање.

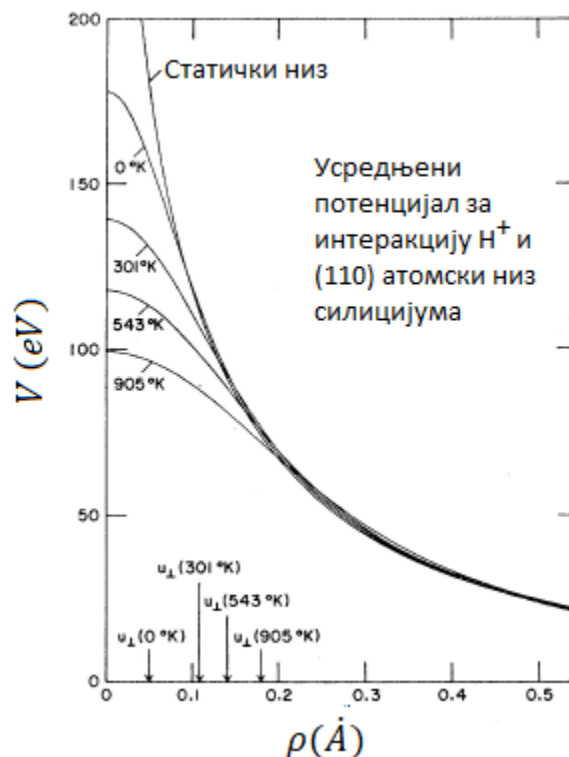
Узимањем у обзир термалних вибрација, потенцијал интеракције и растојање јона од атомског низа се мењају [31]. За каналисане јоне опсега енергија који су разматрани у овом раду, брзина јона је довољно велика да се може узети у обзир да је време интеракције јона са индивидуалним атомима много краће од периода термалних вибрација атома [26]. Због тога је оправдано претпоставити да је време интеракције јона са индивидуалним атомима низова довољно кратко, да јон „види“

атом као стационаран, али се за растојање између јона и атома мора узети у обзир померање атома из стационарног положаја. Потенцијал интеракције ће због овог утицаја, за растојање јон – атом, у обзир узимати усредњено одступање атома низа из свог равнотежног положаја. У оваквом моделу јон ће „видети“ атомске низове као стационарне, али континуални потенцијал интеракције јон - атомски низ ће бити промењен за усредњено термално одступање низа из свог равнотежног положаја [31]:

$$U_i^{th} = U_i + (\sigma_{th}^2/2) (\partial^2 U_i / \partial x^2 + \partial^2 U_i / \partial y^2) \quad 2.9$$

При оваквом кретању претпоставља се да атоми низа вибрирају независно и да су за сваки транслациони степен слободе позиције око равнотежног положаја атома описане Гаусовом функцијом расподеле. Стандардна девијација ове расподеле σ_{th} одговара једнодимензионалној амплитуди термалних вибрација атома и одређена је Дебајевом теоријом термалних вибрација.

Овако одређени усредњени потенцијал интеракције почиње да одступа од одговарајућег статичког потенцијала на раздаљинама знатно мањим од радијуса екранирања, односно на растојањима реда величине термалних вибрација атома, као што је то илустровано на слици 2.4. Међутим, пошто се у случајевима разматраним у овој дисертацији каналисани јон налази довољно далеко од атомског низа (на растојању већем од радијуса екранирања) коришћење израза 2.9 за усредњени континуални потенцијал атомског низа услед утицаја термалних вибрација је оправдан.



Слика 2.4. Зависност потенцијала интеракције протона и атомског низа силицијума Si^{14} оријентације (110) без утицаја термалних вибрација - статички низ и са утицајем термалних вибрација при различитим температурама.

2.5. Енергијски губитци каналисаног јона кроз кристал

Једна од важних особина каналисаног кретања јона, тј. кретања управљаног од стране решетке, је модификација зауставне моћи јона, за разлику од вредности коју би имала када би се јон насумично кретао [9]. Пошто енергијски губитак јона зависи од ударног параметра, у случају каналисања ова чињеница доводи до аномалних енергијских губитака каналисаних јона (у поређењу са насумичним кретањем), што је и експериментално потврђено. Код јона који се насумично крећу кроз кристал усредњени енергијски губитак остаје исти као и у аморфним материјалима. У управљаним системима, путања није независна од кристалне решетке и вредности усредњених енергијских губитака јона могу да се значајно разликују.

Постоје два механизма губитака енергије јона: електронски и нуклеарни [32]. Електронски губитци се јављају услед интеракције јона са електронским гасом атома кристала и последица су предаје енергије јона електронима услед ексцитације на више енергетске нивое, или услед избацивања електрона из орбите. Енергијски губитак јона се креће од неколико eV/nm до неколико стотина eV/nm , што зависи од енергије и масе јона и материјала кристала. Нуклеарни енергијски губитци доминирају за мале енергије и велике вредности атомских бројева јона, док обрнуто важи за електронске губитке, који доминирају за велике енергије и мале вредности атомских бројева јона. Нуклеарна зауставна моћ потиче од блиских судара са атомима кристала уз трансфер енергије.

У каналисању атомски нивои који формирају канал скрећу - усмеравају сноп јона у регион са мањом електронском густином при продирању у кристал, због чега је стопа енергијских губитака значајно редукована [9]. Због овога је домет каналисаних јона већи него за случајно оријентисане јонске снопове. Већи отклон каналисане честице је последица нуклеарних судара, за разлику од интеракције са електронским гасом који мало мењају трансверзални импулс јона. За протоне енергија реда MeV , нуклеарни губитци су само око 0.06% у односу на електронске губитке. Енергија каналисаних јона је трансферована првенствено на електроне. Како је растојање унутар кристалне решетке неколико ангстрема само мала количина енергије се предаје валентним електронима (реда $10 eV$), док се при мањим растојањима у интеракцији са унутрашњим електронима (S и K електронске љуске) предаје знатно већа количина енергије, али је вероватноћа за ове интеракције знатно мања. За мале ударне параметре, мање од радијуса екранирања, јавља се велики трансфер енергије који као последицу има значајно повећање угла расејања, па се за ове ударне параметре не може сматрати да је честица каналисана. Закључује се да су електрони кристала примарно одговорни за енергијске губитке каналисаних јона.

2.6. Критични угао за каналисање

Да би сноп јона доживео трансмисионо кретање кроз канале кристала потребно је да угао који заклапају вектор импулса каналисане честице и оса канала буде мали, тј. мањи од критичног угла за каналисање [9]. Поред тога, најмање растојање на које каналисана честица приђе атомском низу, тј. ударни параметар каналисане честице (трансверзално растојање између каналисане честице и атома који граде канал), мора да буде довољно велико да не дође до расејања под великим углом, или других интеракција које захтевају довољно мале ударне параметре, као

што је то већ напоменуто у претходном поглављу. Докле год су горња два услова задовољена, због утицаја екранизоване електричне одбојне Кулонове силе, честица ће се расејавати под малим углом на атомима који образују канал и биће каналисана ка следећем атомском слоју. Може се рећи да при каналисању потенцијал интеракције канала кристала управља каналисаном честицом.

Правец простирања каналисане честице је лонгитудинални правац, док је раван нормална на овај правац трансверзална раван. Каналисана честица у овом случају не може имати било коју вредност угла који заклапа са осом канала кристала, већ мора имати вредност мању од критичног угла за каналисање. Ако је кинетичка енергија E_k и правац кретања јона θ у односу на осу кристала, тада је трансверзална кинетичка енергија јона $E_{kt} = E_k \sin^2 \theta$, а лонгитудинална кинетичка енергија $E_{lt} = E_k \cos^2 \theta$. Пошто су углови расејања каналисане честице веома мали ($\sin \theta \approx \theta$ и $\cos \theta \approx 1$) онда је $E_{kt} \approx E_k \theta^2$, а $E_{lt} \approx E_k$, из чега се добија критични угао за каналисање, који зависи од максималне трансверзалне енергије јона:

$$\theta_{crt} = \sqrt{U_{ch}/E_{tk}} \quad 2.10$$

где је U_{ch} потенцијал интеракције јона и кристала, $U_{ch} = (2Z_1Z_2e^2)/d$, а Z_1 атомски број каналисаног јона, Z_2 атомски број кристала, e елементарно неелектрисање и d растојање између суседних атома у атомском низу. Ова вредност је добијена уз претпоставку да се каналисани јон не приближава на растојање мање од Томас - Фермијевог радијуса екранирања, односно одговара потенцијалној енергији на овом растојању [9].

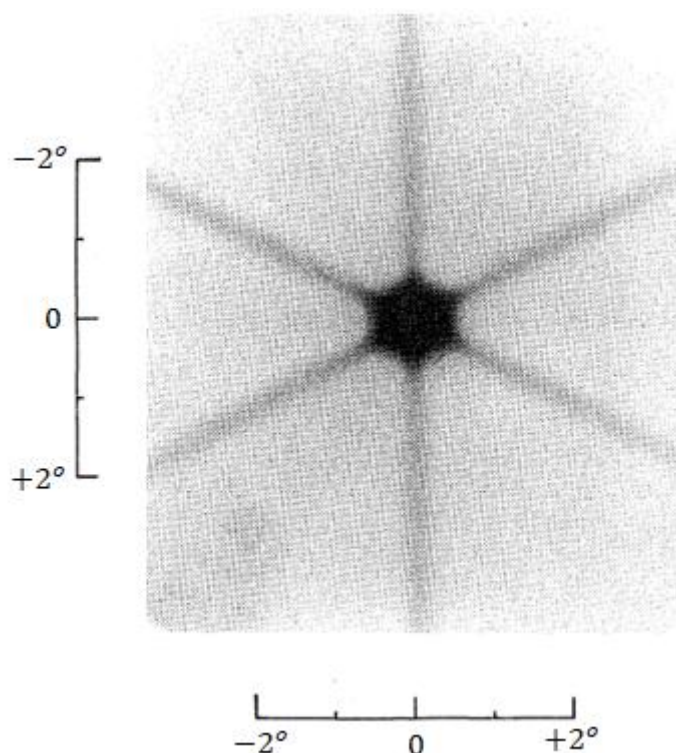
Вредност Томас - Фермијевог радијуса екранирања за кристале који су разматрани у раду је од 0.01 nm до 0.02 nm , што зависи од $Z_2 = (13, \dots, 90)$, док су вредности критичних углова реда делова степена (за опсег коришћених енергија протона).

3. КРИСТАЛНА ДУГА

Значајан и у случају танких кристала доминантан ефекат који се јавља при каналисању јона је ефекат кристалне дуге [26]. Феномен дугиног расејања је први пут примећен у нерелативистичком расејању наелектрисаних честица на индивидуалним атомима и језгрима од стране Форда и Вилера [33], док је прво препознавање ефекта кристалне дуге на атомском низу у кристалној решетки оријентисаној дуж неког од кристалографских праваца објавио Шуљ'га [34]. Недостатак овог теоријског рада је био пропуст узимања у обзир утицаја свих атомских низова, већ испитивање утицаја само једног атомског низа на наелектрисану честицу. Први теоријски рад о кристалним дугама који узима у обзир наелектрисану каналисану честицу и њену трајекторију кроз оријентисан кристал, тј. кроз канале кристала, је дат од стране Нешковића [10], а убрзо затим су предвиђања дата у овом раду и експериментално доказана [15].

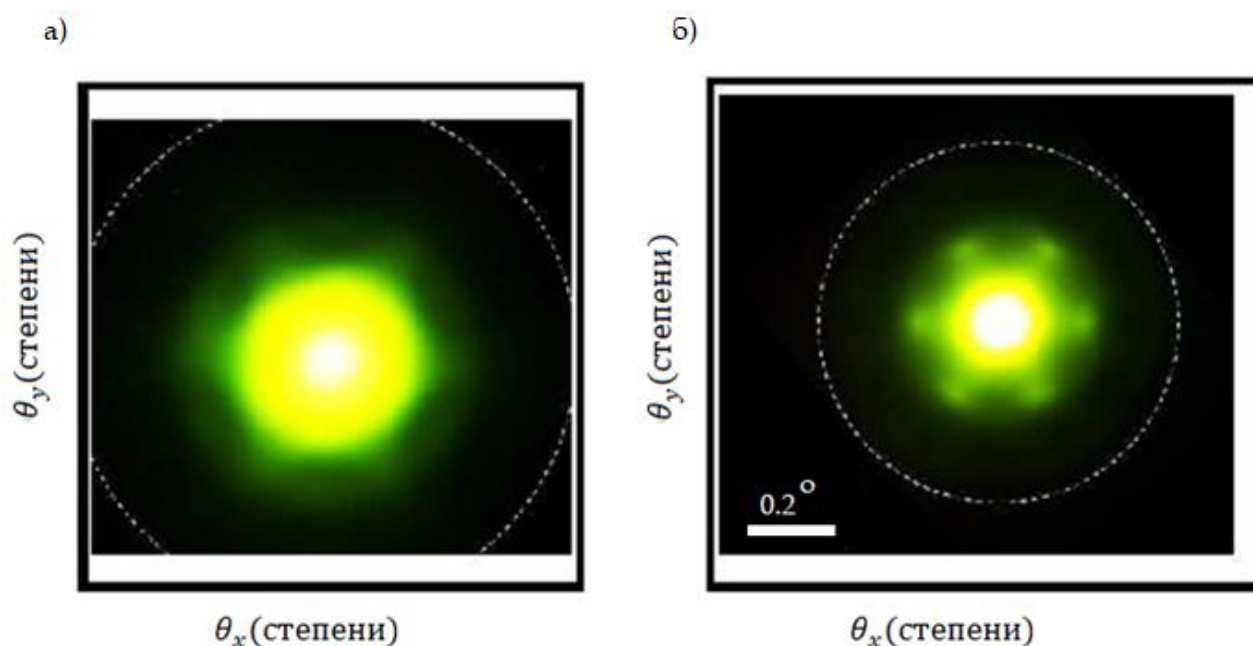
Модел кристалне дуге [10] при каналисању се заснива на чињеници да дводимензионална класична функција дефлексије каналисаног јона поседује екстремуме на одређеним угловима у којима диференцијални ефикасни пресек за расејање тежи бесконачности, као и да се у случају врло танког кристала може применити тзв. импулсна апроксимација која подразумева да се трајекторија трансмитованог јона може апроксимирати правом линијом [10]. Овим моделом се могу успешно објаснити угаоне расподеле каналисаних јона након њихове трансмисије кроз врло танак кристал [10, 15].

Пре препознавања кристалних дуга у каналисању први прегледни теоријски рад о каналисању је објавио Јенс Линдхард, под називом *Influence of crystal lattice on motion of energetic charged particle*, 1965. године, а био је валидан само за дебеле кристале [14]. Линдхардова теорија није била у стању да опише каналисање у веома танким кристалима, јер није узео у обзир корелацију између атомских низова кристала, а није ни препознао ефекат дугиног расејања у каналисању. Његова теорија се базирала на статистичкој механици. Након Линдхардове теорије важан свеобухватан рад о каналисању аутора Доналда С. Гемела под називом *Channeling and related effects in the motion of charged particles through crystals* из 1974. године [9], је поставио темеље за будуће радове о кретању наелектрисаних честица кроз канале кристала, али ни овај аутор није препознао ефекат кристалних дуга у каналисању. У случају довољно дебелих кристала или довољно мале енергије јона током каналисања, ефекат вишеструког расејања ће узроковати да сноп каналисаних јона буде концентрисан дуж одговарајућих оса/равни са краковима мањег интензитета који се пружају радијално [35]. Под таквим околностима се јавља карактеристични ефекат звезде (слика 3.1). Ова појава може успешно да се употреби за одређивање оријентације кристала у експериментима каналисања, али не и за описивање фине угаоне расподеле јона трансмитованих кроз канале танких кристала.



Слика 3.1. Ефекат звезде снимљен при трансмисији протона енергије 2.43 MeV дуж (111) оријентисаног кристала германијума Ge^{34} дебљине $60 \mu\text{m}$. Тамне регије представљају области великог интензитета честица. Домет протона енергије 2.43 MeV кроз аморфни германијум Ge^{34} је приближно $43 \mu\text{m}$.

У случају танких кристала или јона велике енергије расподела трансмитованих јона ће бити знатно компликованија. Ово је илустровано на слици 3.2.



Слика 3.2. Експерименталне расподеле каналисања за протоне енергија: а) 1 MeV и б) 2 MeV , кроз кристал силицијума Si^{14} оријентације (111) дебљине 95 nm .

Са слика 3.1 и 3.2 се види да је трансмисија јона знатно другачија кроз танке кристале него кроз дебеле кристале. У случају дебелих кристала потпуно се губи информација о финој угаоној расподели трансмитованих јона, док код веома танких кристала то није случај.

Детаљна и прецизна теоријска истраживања у циљу развијања бољих нумеричких симулација за теоријско испитивање каналисања, тј. угаоног расејања јона у танким кристалима су показала појаву пораста флукса на одређеним излазним угловима који су последица ефекта дуге (аналогно порасту оптичког флукса светлости на излазном углу дуге из капљице воде). У циљу разумевања ефекта кристалних дуга при каналисању, значајан труд је усмерен ка детаљном разумевању угаоне расподеле каналисаних јона.

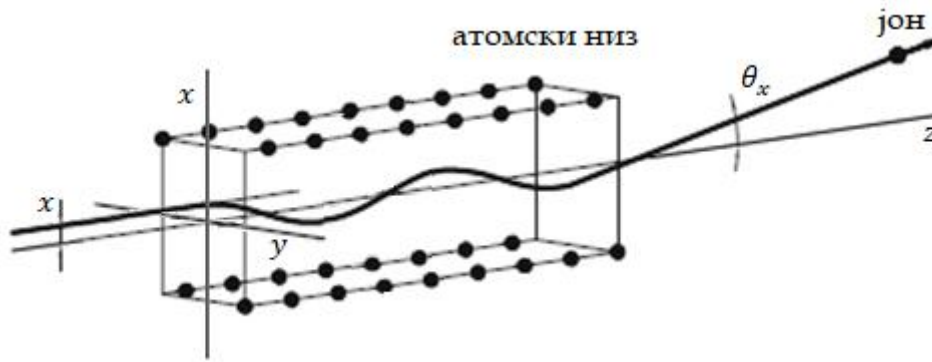
Као што је већ напоменуто, модел кристалних дуга у каналисању је теоријски предложио Нешковић [10], а даља теоријска и експериментална истраживања ефекта кристалне дуге у каналисању су показала да је овај ефекат тачан и прецизан метод за испитивање процеса трансмисије јона кроз аксијалне канале врло танких кристала [15].

Модел кристалне дуге се заснива на импулсној апроксимацији и јон - молекулској теорији расејања [10]. Веома танки кристали су они чија је дебљина таква да се трајекторија каналисане честице може у довољно доброј апроксимацији представити правом линијом (слика 3.4). Даље, танким кристалима сматрамо оне код којих се скретање трајекторије од праве линије не може занемарити закључно са оном дебљином кристала када трајекторија каналисаног јона око центра канала направи једну пуну осцилацију, док се кристал може назвати дебелим ако каналисани јон направи више од целе осцилације. У моделу кристалних дуга ефекат трансверзалних корелација између атомских низова је на правилан начин узет у обзир као и ефекат термалних вибрација атома у кристалу, при чему је у довољно доброј апроксимацији занемарена интеракција јона са електронским гасом кристала.

Проф. Л. Т. Чадертон, оснивач научног часописа *Radiation Effects and defects in solids*, у свом извештају о раду везаном за каналисање јона кроз кристал Винчанске групе аутора, је изјавио следеће [*приватна конверзација*]:

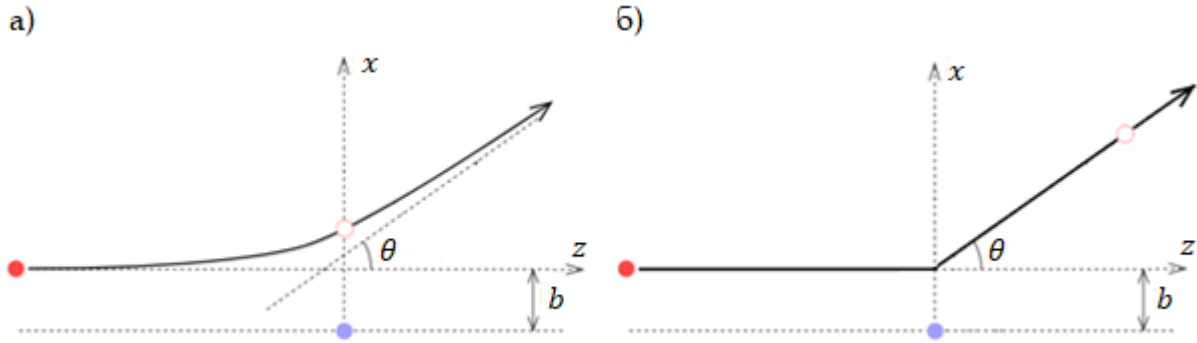
1. *The rainbow description of channeling could have appeared before its accidental discovery, in a computer simulation.*
2. *The rainbow origin of channeling is so obvious that every honest condensed matter or scattering physicist should say to himself: „How stupid I was not to think of that“.*
3. *In his seminal theoretical treatment of channeling Lindhard recognized intrinsic near - field physics and potential continua. But, he didn't realize that there was an alternative and much more fundamental approach to the phenomenon – the rainbow approach.*

Шема процеса каналисања позитивних јона приказана је на слици 3.3:



Слика 3.3. Шематски приказ процеса трансмисије јона кроз аксијални канал кристала.

Јон се креће лонгитудиналним правцем и наилази на канал кристала, при чему је улазна раван трансверзална раван кристала [26]. При уласку у канал каналисана честице има све дозвољене вредности ударних параметара у улазној равни. У првој апроксимацији може се претпоставити да су вредности вероватноћа свих ударних параметара исти и да су почетне трансверзалне брзине једнаке нули, односно да се ради о паралелном снопу јона. Током трансмисије кроз кристал каналисани јон доживљава велики број повезаних расејања под малим углом на атомским низовима кристала, који образују канал. Он излази из кристала под углом $\theta = \theta_y, \theta_x$. Овакво кретање је погодно посматрати из Декартовог координатног система, где се z - оса поклапа са лонгитудиналним правцем и осом канала, а трансверзална раван се поклапа са $y - x$ равни (видети слику 3.3). Почетна позиција честице се означава са $b(y_0, x_0)$, а почетни вектор импулса јој је $p_0 = p_z$, док је оса канала у тачки $(y = 0, x = 0)$. Дакле, претпоставићемо да је раван ударних параметара једнака улазној равни кристала. Током каналисања, због услова да расејање јона буде под малим углом (мањим од критичног угла за каналисање), трансверзална компонента вектора импулса јона остаје мала током целог процеса каналисања. Лонгитудинална компонента вектора импулса p_z се може користити као константа кретања, уместо времена каналисања t , или брзине каналисања v , односно пропорционална је са вредностима z - координате. Користећи дводимензионални континуални потенцијал интеракције, у случају довољно великог импулса јона, односно довољно танког кристала, расејање јона при каналисању може да се сведе на расејање под малим углом на ефективном потенцијалу расејавача, тј. танак кристал може да се посматра као да је сажет на дебљину равни. У овом случају важи импулсна апроксимација [26]. Импулсна акпроксимација приликом расејања јона на атому је илустрована на слици 3.4.



Слика 3.4. а) Трајекторија позитивног јона при расејању на атому и б) трајекторија истог процеса у импулсној апроксимацији.

Почетни и крајњи ударни параметар су исти, док се угао расејања може добити из односа трансверзалне компоненте импулса расејане честице и лонгитудиналне компоненте импулса. У овакој апроксимацији може да се покаже [26] да угао расејања θ износи:

$$\theta(b) = -(L/2E) \text{grad}[U(b)] \quad 3.1$$

где је θ угао расејања, b ударни параметар, L дужина (дебљина) кристала, E енергија јона, $U(b)$ континуални потенцијал интеракције јона и кристала, $\theta(b) = (\theta_y, \theta_x)$ је дводимензионална функција дефлексије каналисаног јона, при чему је $\text{grad}[U(b)] = (\partial_x U, \partial_y U)$. Протон - кристал потенцијал интеракције је једнак суми свих протон - атом потенцијала интеракције који доприносе процесу расејања. Овај израз даје везу између почетних позиција јона и њихових углова расејања. Углови расејања образују раван угла расејања, тј. једначина 3.1 пресликава раван ударног параметра јона у раван угла расејања каналисаних јона.

У процесу расејања, односно трансмисији каналисаног јона кроз танак кристал, што је у општем случају приказано на слици 3.3, а у посебном случају врло танког кристала приказано на слици 3.4, када важи импулсна апроксимација, потребно је одредити диференцијални ефикасни пресек расејања. То је опсервабилна величина која се дефинише као однос елементарне површине у простору удараног параметра $db_x db_y$ и броја расејаних честица под поларним и азимуталним угловима θ и Φ у њиховој елементарној површини $\sin \theta d\theta d\Phi$: $\sigma_{diff} = (1/\sin \theta)(db_x db_y / d\theta d\Phi)$. Полазећи од релација између углова дефлексије θ_x и θ_y и азимуталног и поларног угла, $\tan \Phi = \tan \theta_y / \tan \theta_x$ и $\tan^2 \theta = \tan^2 \theta_x + \tan^2 \theta_y$, може се показати да важи следећа релација [37]:

$$\sigma_{diff}(b) = \frac{\left\{1 - [\sin(\theta_x(b)) \sin(\theta_y(b))]^2\right\}^{3/2}}{\cos \theta_x(b) \cos \theta_y(b)} \frac{1}{|J_\theta(b)|} \quad 3.2$$

где је $J_\theta(b)$ Јакобијан пресликавања из равни ударног параметра у раван угла расејања:

$$J_\theta(b) = \partial_{x_0} \theta_x \partial_{y_0} \theta_y - \partial_{y_0} \theta_x \partial_{x_0} \theta_y \quad 3.3$$

где су x_0 и y_0 , координате ударног параметра, а $\theta_x(x_0, y_0)$ и $\theta_y(x_0, y_0)$ координате функције дефлексије. Када су углови функције дефлексије мали, што је испуњено за енергије јона разматране у овој дисертацији (критичан угао за каналисање је реда делова степена) из израза 3.1 следи [38]:

$$\sigma_{diff}(b) = \frac{1}{|J_\theta(b)|} \quad 3.4$$

Ефекат кристалне дуге се јавља када је $J_\theta(b) = 0$. При томе је диференцијални пресек за расејање сингуларан. Постоји јасна аналогија са метеоролошком дугом, где је дугин угао одређен када је извод функције дефлексије једнак нули. Јакобијан $2D$ пресликавања представља генерализацију извода $1D$ пресликавања у случају метеоролошке дуге. Решења једначине $J_\theta(b) = 0$ дефинишу линије дуге у равни ударног параметра. Слика ових линија помоћу пресликавања из равни ударног параметра у раван угла расејања дефинише линије дуге у равни угла расејања.

Може се показати да се у случају важења импулсне апроксимације функција J може написати као сума две функције J_0 и J' :

$$J_0 = \sum_{i=1}^M J_{ii} \text{ и } J' = \sum_{i=1}^{M-1} \sum_{j=i+1}^M (J_{ij} + J_{ji}) \quad 3.5$$

где је M број атомских низова узетих у обзир приликом расејања [10]. Члан J_{ii} описује појединачна расејања јона на сваком атомском низу, а чланови J_{ij} и J_{ji} описују заједнички допринос расејању јона на i - том и j - том атомском низу. Такође, пошто важи да $J_0 \neq 0$, постојање члана J' је узрок настанка кристалне дуге. Дакле, ефекат кристалне дуге у случају врло танког кристала је последица истовремених расејања на паровима атомских низова канала који доприносе процесу расејања [10]. Треба напоменути да ово не важи када није могуће применити импулсну апроксимацију, али да се и у општем случају ефекат кристалне дуге може приписати заједничком деловању атомских низова на каналсану честицу.

Убрзо након открића ефекта кристалне дуге, он је експериментално потврђен [15]. Ово је значило да је модел кристалне дуге, заснован на импулсној апроксимацији расејања и континуалном моделу атомског низа, тачан модел описивања каналисања јона кроз веома танке кристале.

Недостатак импулсне апроксимације расејања, а самим тиме и модела кристалне дуге је што је она примењива само на веома танке кристале. Дефинисањем параметра $\Lambda = t/T$ као редуковане дужине кристала [39], који представља однос времена кретања јона кроз канал t и периода осциловања јона око осе канала T , могуће је проценити важење импулсне апроксимације и дати једну могућу грубу поделу кристала (која зависи од његове дебљине и енергије снопа каналисаних јона). Ако је параметар Λ мали, мањи од 0.10, отклон јона је довољно мали да се највећи број његових трајекторија може апроксимирати правом линијом и кристал је врло танак, ако је овај параметар већи од 0.10 и мањи од 1, односно ако каналисани јон око центра канала направи мање од једне осцилације, кристал је танак. У осталим случајевима кристал је дебео. За редуковану дужину кристала важи следећи израз [39]:

$$\Lambda = f(m_1, q_1) L/v_{av} \quad 3.6$$

где је $f(m_1, q_1)$ фреквенција осциловања јона око осе канала, m_1 маса каналисаног јона, q_1 наелектрисање јона, L дужина канала, v_{av} средња вредност вектора брзине јона.

У општем случају, да би се добио закон расејања, односно зависност угла расејања од ударног параметра тј. $2D$ функција дефлексије, потребно је решити одговарајуће Њутнове једначине кретања [16]:

$$m_1(d/dt) \vec{v} = -\nabla U(\rho) \quad 3.7$$

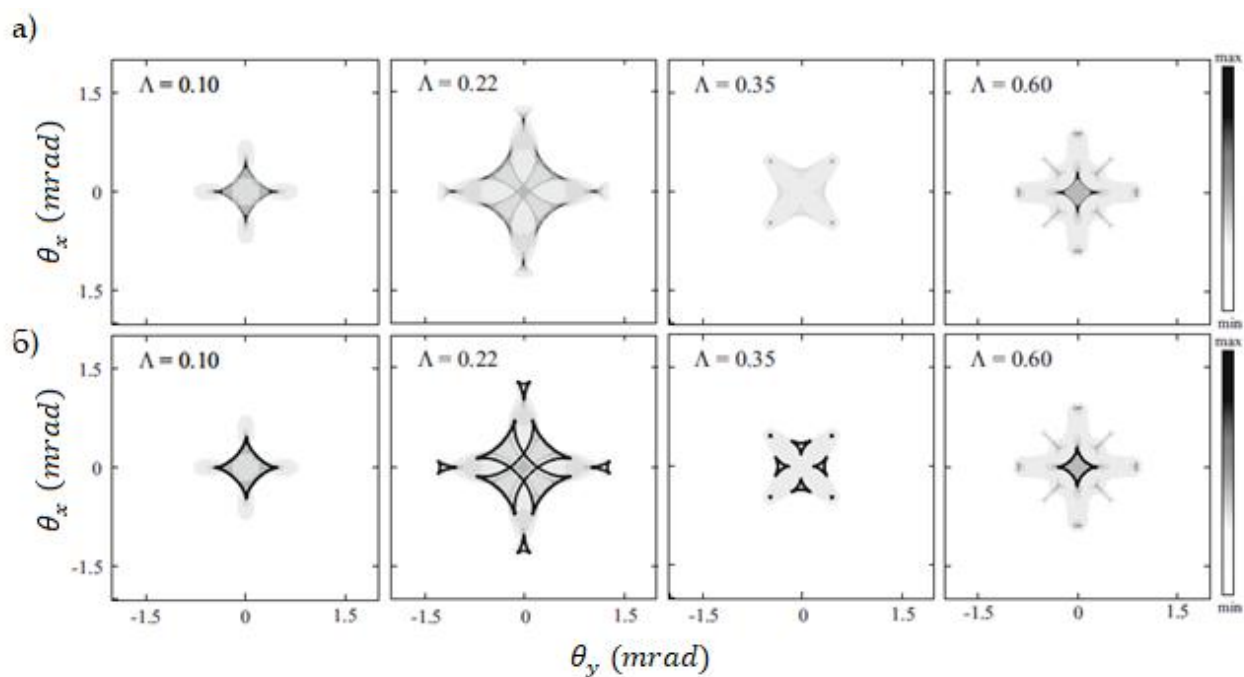
где је $\vec{v} = (v_x, v_y)$ вектор трансверзалне брзине каналисаног јона. Вектор угла дефлексије јона $\vec{\theta} = (\theta_x, \theta_y)$ се мења у току кретања, при чему важи $\tan \theta_x = v_x/v_z$ и $\tan \theta_y = v_y/v_z$, респективно. Као што је већ напоменуто, у овој дисертацији ћемо разматрати танке кристале и енергије протона тако да је $\tan \theta_x \approx \theta_x$ и $\tan \theta_y \approx \theta_y$. Поред тога претпоставићемо да се ефекат енергијског губитка јона при трансмисији кроз кристал може занемарити, тако да важи $v_z = \sqrt{2E/m_1} = \text{const.}$

Дакле, у општем случају, решења једначине:

$$|det J_\theta(b, t)| = 0 \quad 3.8$$

одређују линије дуге у равни ударног параметра, а помоћу пресликавања $\theta_x(t) = v_x(t)/v_z$ и $\theta_y(t) = v_y(t)/v_z$ одређене су линије дуге у равни угла расејања [16]. Њихово пресликавање у раван угла трансмисије дефинише линије дуге у равни угла расејања.

Из једначине $|J_\theta(b)| = 0$ следи да је инверзно пресликавање $\theta \rightarrow b$ вишеструко, а линије дуге у равни угла расејања раздвајају области различитих мултиплицитета при пресликавању $b \rightarrow \theta$. Области већег мултиплицитета се називају светла страна дуге, док се области мањег мултиплицитета називају тамна страна дуге. При томе дуж линија дуге у равни угла расејања долази до њиховог фокусирања и оне образују „скелет“ одговарајућег угаоног доприноса каналисаних јона. Ово је илустровано на слици 3.5 за различите вредности параметра Λ у случају трансмисије јона Ne^{10+} енергије 60 MeV кроз (001) канале кристала силицијума [16].



Слика 3.5. Поређење еволуције угаоних расподела трансмитованих јона Ne^{10+} кроз (001) канале кристала силицијума за: а) $\Lambda = 0.1, 0.22, 0.35$ и 0.6 и б) линије дуге добијених применом теорије кристалних дуга. Области у којима је допринос трансмитованих јона изнад 60, 30, 15 и 5% од максималног доприноса су респективно означене опадајућим нијансама сиве боје.

4. ОПИС НУМЕРИЧКОГ ПРОРАЧУНА КАНАЛИСАЊА

У циљу теоријског испитивања процеса каналисања протона кроз отворене канале кристала у Лабораторији за физику Института за нуклеарне науке „Винча“ је развијен нумерички компјутерски програм за испитивање каналисања написан у програмском језику Фортран (*Formula Translation*).

Фортран је програмски језик посебно погодан за нумеричко рачунање. У употреби је више од шест деценија у научним областима, као што су нумеричко предвиђање времена, анализа коначних елемената, геофизика, нумеричка физика, нумеричка хемија... То је популаран језик за рачунарство високих перформанси и користи се за програме који упоређују и рангирају најбрже супер - рачунаре на свету. Пошто се већ веома дуго користи, постоји огроман број софтверских програма писаних у Фортрану који се свакодневно користе у научним и инжењерским заједницама.

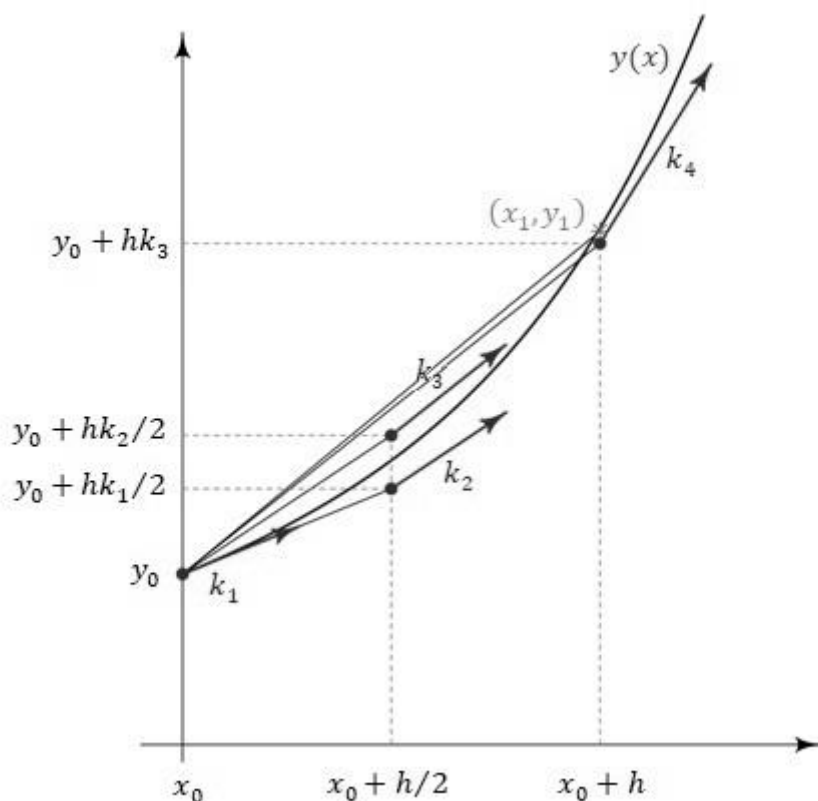
Помоћу овог нумеричког кода испитано је понашање протона при кретању кроз канале кристала са кубном кристалографском структуром оријентисаних дуж главних кристалографских правца, оријентација (001), (011) и (111) за 28 различитих кристала: *V, Cr, Fe, Nb, Mo, Ba, Eu, Ta, W, Al, Ca, Ni, Cu, Sr, Rh, Pd, Ag, Ce, Yb, Ir, Pt, Au, Ce, Yb, Ir, Pt, Au, Pb, Th, C, Si, Ge* и *Sn*.

У почетном делу програма задају се параметри експеримента, као што су врста упадног јона и његова енергија, врста кристала мете, оријентација кристала, облик канала, угао између снопа јона и осе канала кристала, врста потенцијала интеракције, подела улазне равни кристала на сегменте (број упадних јона). Након задатих почетних услова нумеричке симулације експеримента, програм рачуна трансверзалне позиције каналисаног јона кроз канал и његове углове дефлексије нумеричким решавањем одговарајућих Њутнових једначина кретања у трансверзалној равни (једначина 3.7).

На основу података о дебљини кристала и брзини протона добија се број временских корака за израчунавање нових трансверзалних положаја протона кроз канал у сваком тренутку. Главна петља програма се понавља онолико пута колико има временских корака. Пошто нумеричка прецизност израчунавања кристалних дуга зависи од величине временског корака као и од густине поделе у улазној равни ударног параметра (број упадних јона), примењена је оптимална метода тако да је добијена довољно густа подела у равни ударног параметра и довољно мала вредност временског корака, тако да се израчуна довољно прецизна и добро дефинисана линија дуге у равни ударног параметра и равни угла расејања.

За нумеричко решавање диференцијалних једначина кретања у трансверзалној равни користи се Рунге - Кута метод четвртог реда [40]. Многи математички модели који се јављају у различитим применама се могу описати помоћу обичних диференцијалних једначина. Једна од напознатијих метода за нумеричко решавање обичних диференцијалних једначина је Рунге - Кута метод. У нашем програму примењен је тзв. Рунге - Кута метод четвртог реда, RK4 метод.

Нека су (x_0, y_0) почетне позиције протона у равни ударног параметра, а (x_1, y_1) тражене трансверзалне позиције протона у следећем временском кораку.



Слика 4.1. Графички приказ методе Рунге - Кута четвртог реда.

У сваком кораку вредност прираштаја се рачуна четири пута, на основу којих се добија коначна вредност функције. Вредност прираштаја је једнака: $dy = (1/6)(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4)$, где су коефицијенти k_1 , k_2 , k_3 и k_4 рачунати на почетку, половини и на крају интервала, а h је одабрани временски корак Δt . Одређивање ових коефицијената је графички приказано на слици 4.1. Ово је метода четвртог реда, што значи да је локална грешка заокруживања реда $O(h^5)$, док је укупна акумулирана грешка реда $O(h^4)$.

Нумерички одређене позиције и брзине каналисане честице користе се за нумеричко одређивање Јакобијана пресликавања из равни ударног параметра у раван угла расејања. Нумеричке вредности Јакобијана пресликавања су добијене високо прецизном методом нумеричке диференцијације коришћењем Ричардсоновог метода екстраполације шестог реда [41], која узима три симетричне вредности разлике количника са великим дискретним кораком. Ричардсонова екстраполациона метода шестог реда је развијена за решавање дводимензионалних и тродимензионалних парцијалних диференцијалних једначина на униформним координатним мрежама.

У свакој тачки у трансверзалној равни рачуна се вредност Јакобијана пресликавања на основу три симетричне тачке са леве и са десне стране, корака $h, 2h, 3h$ где је h величина реда 10^{-4} . На основу ових шест вредности Ричардсоновом методом екстраполације добија се веома прецизна апроксимативна вредност у свакој траженој тачки у равни ударног параметра. Ричардсонова метода коју смо ми користили користи тзв. метод централног извода [42]. Централни извод је апроксимација извода функције, $f'(x) = \frac{f(x+h)-f(x-h)}{2h} - \frac{1}{6}f'''(x)h^2 + \dots = f'_{\pm h}(x) + e_h(x)$,

где је $f'_{\pm h}(x) = \frac{f(x+h)-f(x-h)}{2h}$ централни извод. Грешка централних извода је мања по апсолутној вредности од извода улево или извода удесно. Упркос томе што је у изразу за централни извод двоструко већи корак $2h$ него за извод улево или удесно, он је много тачнији од два нецентрална извода. Ову чињеницу је Ричардсон искористио да развије методу побољшања првог извода увођењем додатних тачака симетрично распоређених око тражене тачке x . Он је увео додатне две симетричне тачке корака $2h$ од тражене тачке x , а између којих је растојање $4h$.

Вредност извода функције за симетричан корак од $2h$ је, $f'(x) = \frac{f(x+2h)-f(x-2h)}{4h} - \frac{4}{6}f'''(x)h^2 + \dots = f'_{\pm 2h}(x) + 4e_{\pm h}(x) + \dots$, одакле се види да је грешка за дупло већи корак четири пута већа. Ова грешка је $e_{\pm h}(x) = \frac{1}{3}[f'_{\pm h}(x) - f'_{\pm 2h}(x)] + e(h^4)$, где је $e(h^4) = \frac{h^4}{30}f''''(x)$. На основу грешке извода може да се одреди први извод за корак од h : $f'(x) = \frac{4f'_{\pm h}(x) - f'_{\pm 2h}(x)}{3} + e(h^4) = f'_2(x, h) + e(h^4)$, где је $f'_2(x, h)$ друга апроксимација првог извода функције у тачки x за корак апсцисе h . Аналогно томе прва апроксимација је једнака центрираном изводу око тачке x : $f'_1(x, h) = f'_{\pm h}(x)$ и $f'_1(x, 2h) = f'_{\pm 2h}(x)$. Дакле, $f'_2(x, h) = \frac{4f'_1(x, h) - f'_1(x, 2h)}{3}$ и повезује две узастопне апроксимације. Друга апроксимација извода је боља од прве, пошто израз за прву апроксимацију извода садржи грешку реда величине h^2 , а за другу апроксимацију извода реда h^4 . Општи облик формуле за $n + 1$ апроксимацију извода је дат изразом, $f'_{n+1}(x, h) = [2^{2n}f'_n(x, h) - f'_n(x, 2h)]/(2^{2n} - 1)$ и назива се Ричардсонова екстраполација извода.

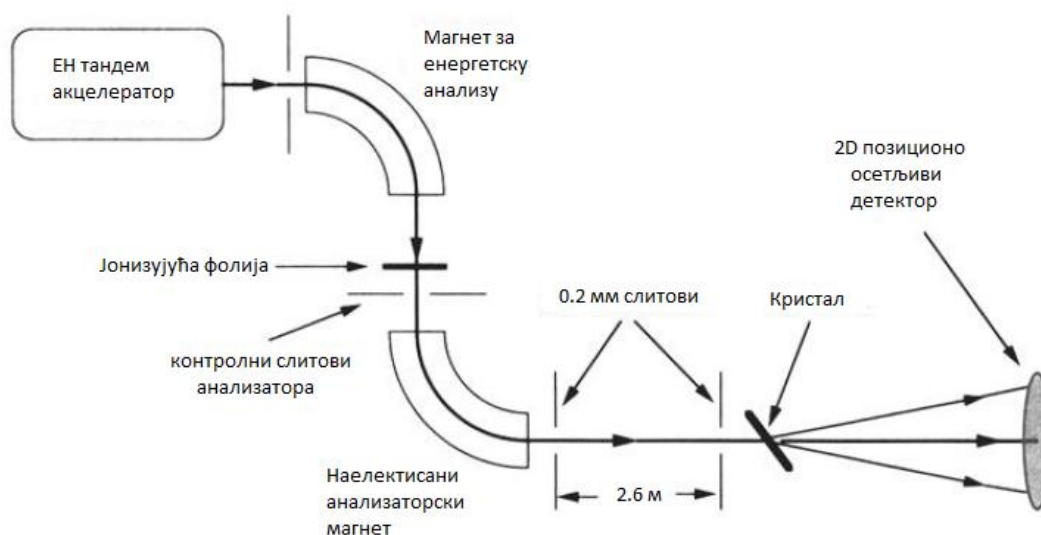
Као што је већ напоменуто, при нумеричком израчунавању извода који се садржи у одговарајућој функцији Јакобијана (једначина 3.3) користили смо Ричардсонов метод екстраполације извода са шест симетричних тачака. Иначе, у пракси се овај метод показао као веома прецизан и ефикасан.

Након рачунања Јакобијана у свакој тачки равни ударног параметра програм проверава за сваке две суседне тачке у простору да ли долази до промене знака вредности функције Јакобијана. За две суседне тачке код којих долази до промене знака, Јакобијан има вредност нула у простору између те две тачке. Прецизна вредност нуле Јакобијана добија се екстраполацијом на основу вредности ове функције за три тачке пре и после промене знака. Овим се главна петља програма завршава, а остају снимљене линије дуга у равни ударног параметра и у равни угла расејања, које се могу учитати у разне програме за графичко приказивање.

5. ОДРЕЂИВАЊЕ ПОТЕНЦИЈАЛА ИНТЕРАКЦИЈЕ ПРОТОНА И СИЛИЦИЈУМА НА ОСНОВУ ЕФЕКТА ДУГЕ У КАНАЛИСАЊУ

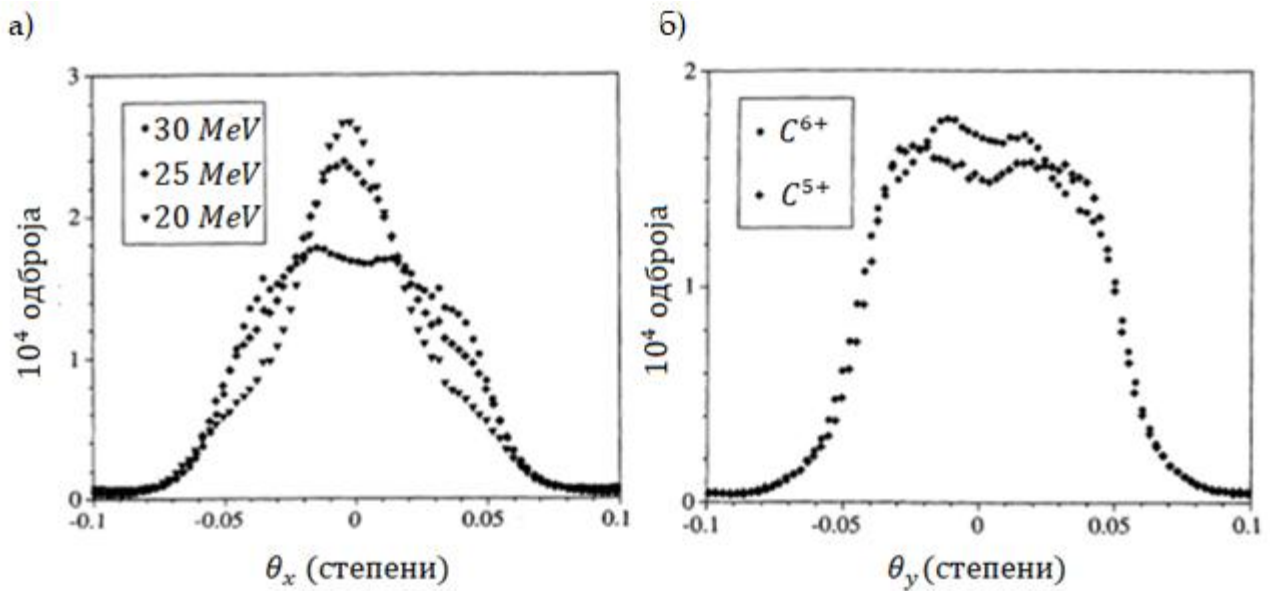
За одређивање потенцијала интеракције протона и силицијума Si^{14} на основу ефекта дуге коришћени су експериментални резултати групе из Сингапура [42]. Поред ових резултата, коришћени су и експериментални резултати групе из Националне лабораторије *Oak Ridge*, у САД [39]. У овом поглављу биће детаљно хронолошки описани горе поменути експерименти.

У експерименту групе из *Oak Ridge* извор јона је био акцелератор са протонима енергија 2 – 9 MeV и јонима угљеника C^{12} енергија 6 – 30 MeV који су каналисани кроз кристал силицијума Si^{14} оријентације (001) и дебљине 1792 Å и 1900 Å. Угаона дивергенција снопа је 0.005° , док је озрачени део кристала дијаметра 0.18 mm. Радни вакуум коморе са узорком је $2 \cdot 10^{-7}$ torr као и вакуум дуж целе линије снопа. Детектор је 2D позиционо осетљива микроканална плоча постављена 2.5 m иза узорка. Позициона резолуција детектора је око 100 μm , тј. 0.006° угаоне резолуције у обе димензије. Експериментална поставка приказана је на слици 5.1.



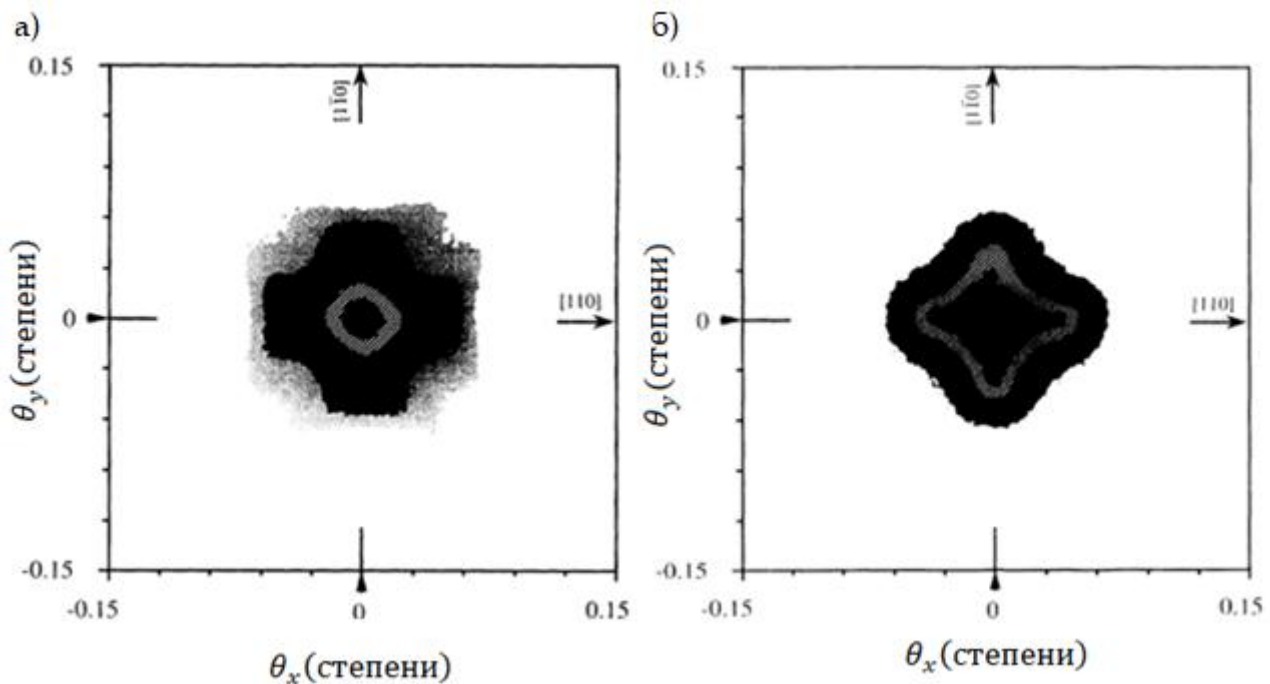
Слика 5.1. Шема експерименталне поставке из референце [15].

За анализу измерених угаоних расподела јона коришћен је компјутерски код *LAROSE* [43] за симулацију каналисања јона, који рачуна трајекторије јона кроз кристал. Ово је био први експеримент где је детаљано изучавана промена угаоних расподела јона са променом његове енергије и наелектрисања. Ово је приказано на слици 5.2.



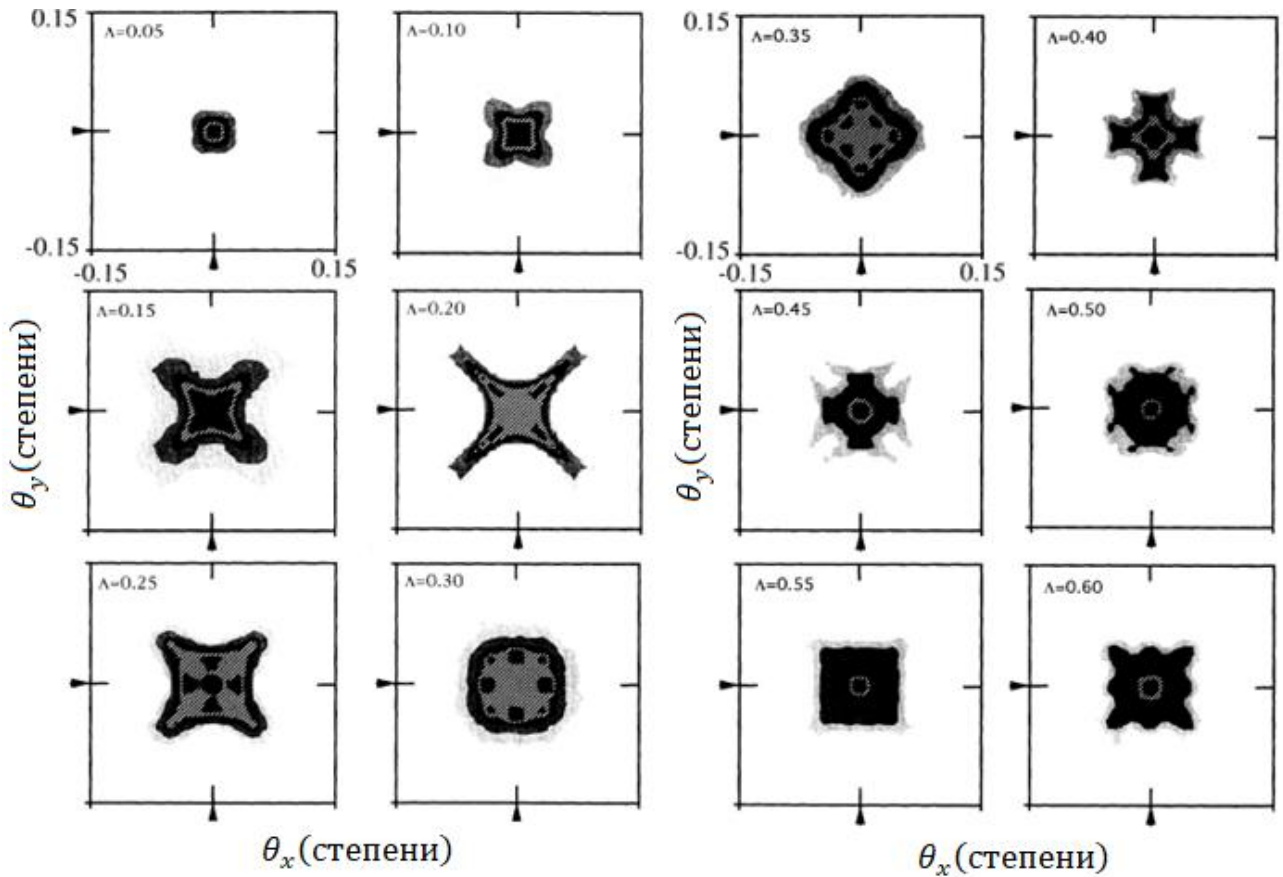
Слика 5.2. Пресек кроз центар измерене угаоне расподеле за: а) различите енергије снопа угљеника C^6 и б) за различит степен јонизованости угљеника.

На слици 5.3 су приказане измерене угаоне расподеле за две енергије од 20 MeV и 30 MeV јона угљеника C^{6+} .



Слика 5.3. Измерене угаоне расподеле каналисаних јона угљеника C^{6+} енергија: а) 20 MeV и б) 30 MeV.

Види се да су за ове две енергије измерене квалитативно различите угаоне расподеле јона угљеника C^{6+} . Код енергије од 20 MeV расподела је усмерена између атомских низова, док је код енергије од 30 MeV усмерена ка атомским низовима који образују канал. На основу овог резултата, аутори су теоријски добили еволуцију кристалних дуга са променом редуковане дебљине кристала, користећи програм LAROSE. Ова еволуција кристалних дуга је приказана на слици 5.4.

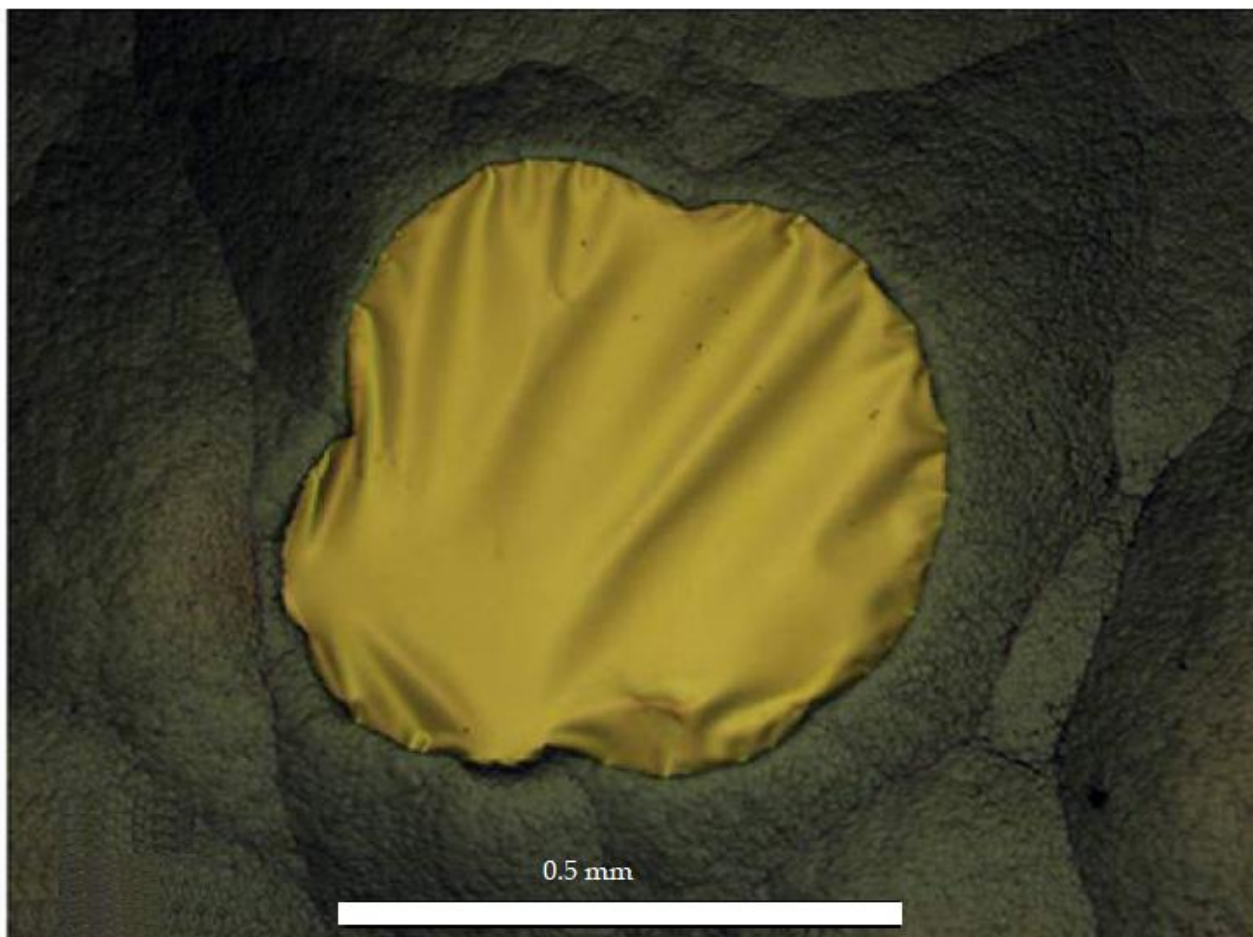


Слика 5.4. Симулирана еволуција угаоне расподеле каналисаних јона C^{6+} енергије 25 MeV кроз (001) канал кристала силицијума Si^{14} .

Због ограничене резолуције детектора и саме поставке експеримента није било могуће измерити фину структуру угаоне расподеле трансмитованих јона.

У периоду од 2011. до 2014. године група из националног Универзитета у Сингапуру, обавила је низ експеримената са протонима енергија од 0.7 MeV до 2 MeV каналисаних кроз ултра танке силицијумске Si^{14} мембране, дебљине 55 nm [44-48]. Предност ових мерења у односу на претходне експерименте је везана за чињеницу да је кристал тањи - 55 nm (у поређењу са дебљинама од 140 nm и 179 nm из реф. [15]), при чему је коришћен микро - сноп који са једне стране омогућава, због својих микронских димензија, селекцију довољно доброг дела силицијумске мембране за каналисање, док се са друге стране сноп може сматрати паралелним, односно његова конвергенција - дивергенција је занемарљива [49]. Структура и оријентација добијених мембрана је испитана помоћу *RBS* и *AFM* респективно и урађено је оптичко мерење мембрана, што је приказано на слици 5.5.

За мерење угаоних расподела коришћен је високо осетљиви *YAG* сцинтилациони екран премазан алуминијумом постављен 0.5 m иза силицијумске мембране.

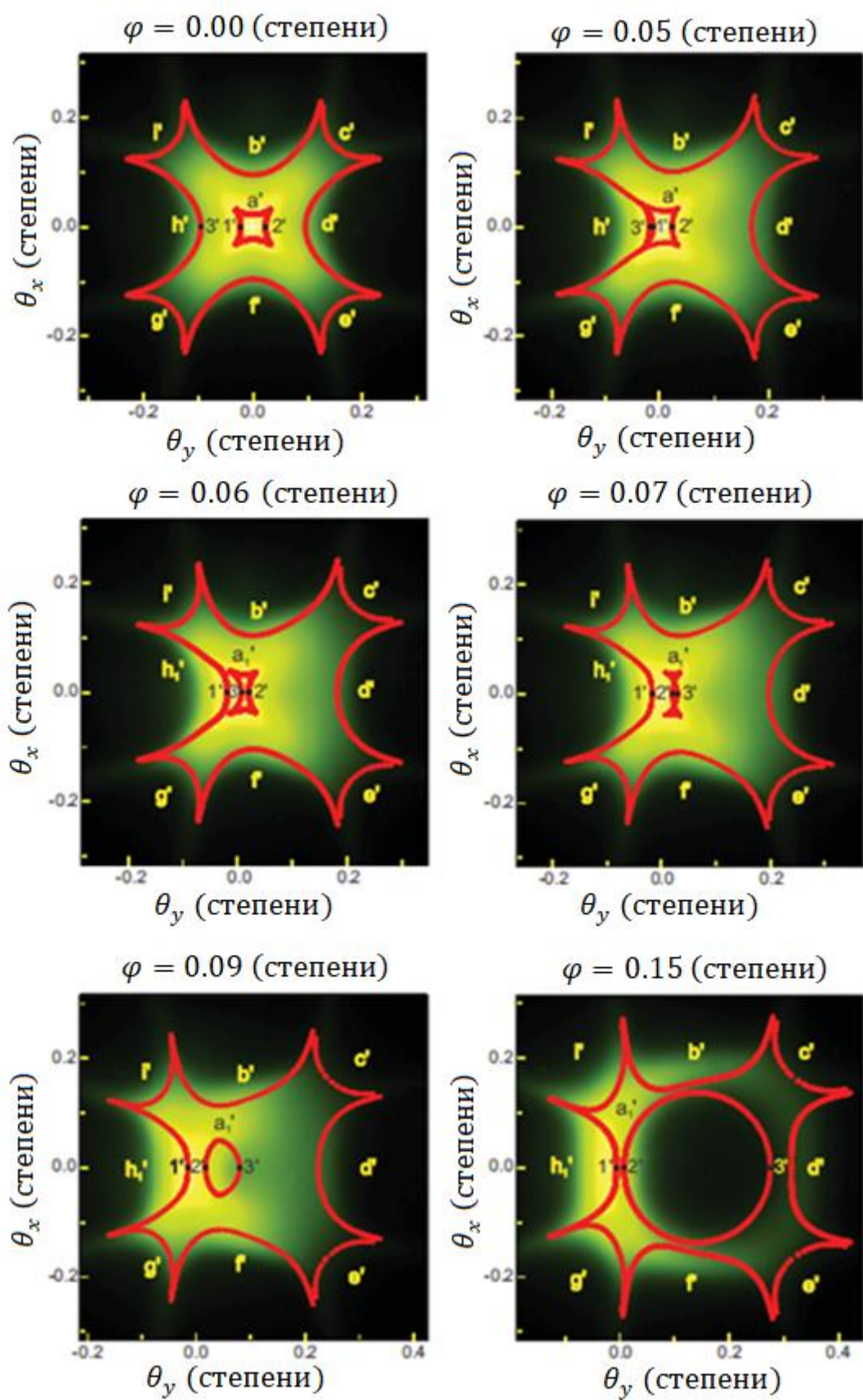


Слика 5.5. Оптичка микрографија силицијумских мембрана дебелих 55 nm .

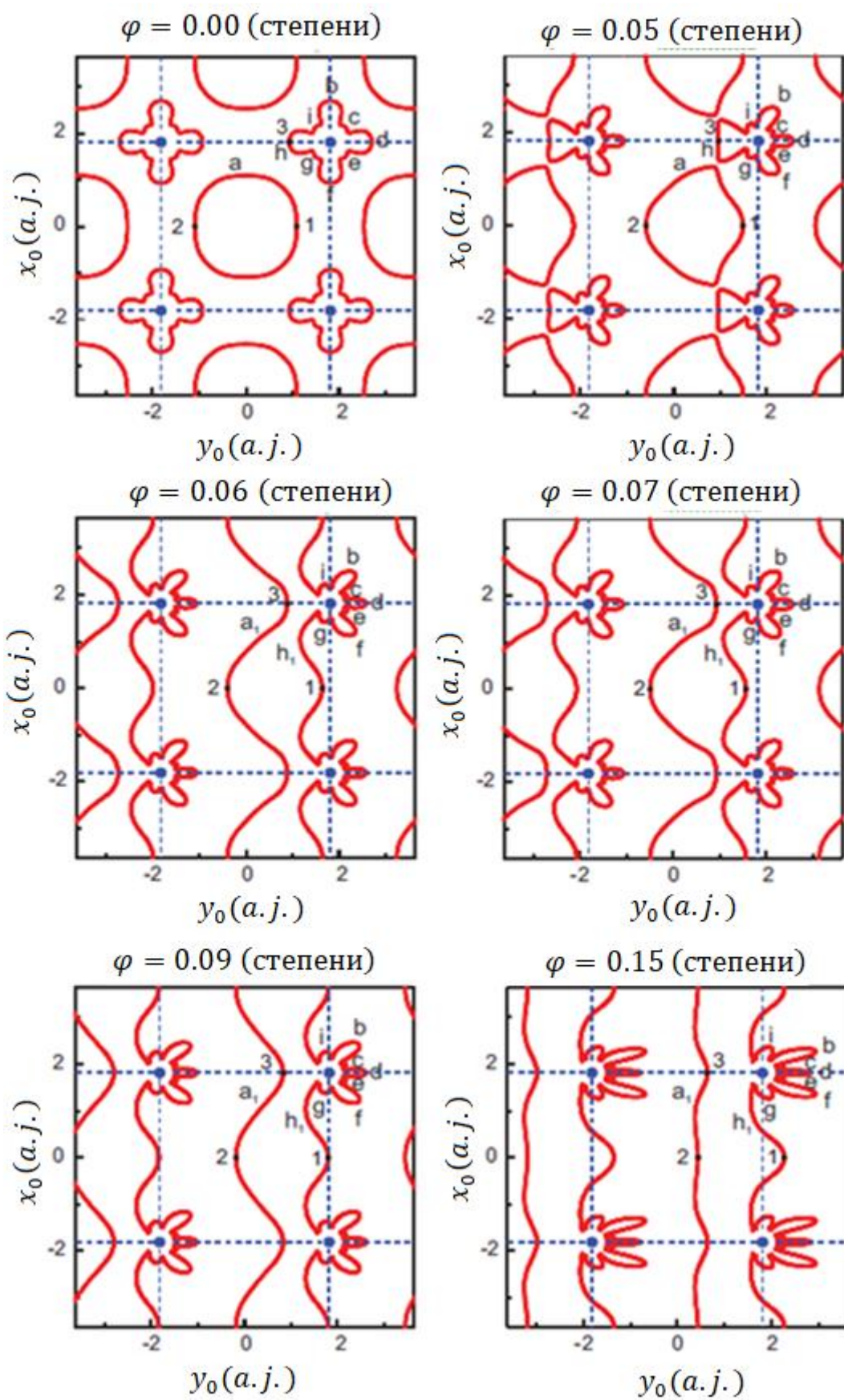
Ова група је користила програм за симулацију кретања јона кроз кристал, *FLUX*, који је користио ZBL универзални потенцијал интеракције [50, 51]. Поред мерења угаоних расподела за различите енергије протонског снопа, мерене су и секвенце угаоних расподела када се угао закретања кристала мења, при чему је уочен ефекат *крофне* (*doughnut effect*), који је назван по свом карактеристичном кружном облику, који је раније примећен у експерименталним резултатима каналисања протона кроз танке силицијумске кристале [52]. Коришћењем теорије кристалних дуга, у заједничком раду Сингапурске групе и групе из Института за нуклеарне науке „Винча“, показано је да је овај ефекат крофне у каналисању јона кроз танке мембране манифестација ефекта кристалне дуге [53]. Детаљном морфолошком анализом добијених експерименталних мерења каналисања Сингапурске групе и њиховим поређењем са теоријским моделом кристалних дуга добијено је одлично поклапање, које је показало да се еволуција угаоне расподеле каналисаних протона може довољно прецизно описати еволуцијом линија кристалне дуге.

На слици 5.6 је приказана секвенца експерименталних угаоних расподела протона енергије 2 MeV трансмитованих кроз 55 nm дебео кристал силицијума Si^{14} оријентације (001) добијен окретањем кристала од правца [100] за угао φ у вредностима од 0.00, 0.05, 0.06, 0.07, 0.09 и 0.15 степени. Слика 5.6 такође показује одговарајуће линије дуге помоћу којих се може јасно видети да њихов облик довољно добро одређује одговарајућу угаону расподелу, односно да оне представљају „скелет“ угаоних расподела. Централни део линија дуге је облика

криволинијског квадрата зашиљених темена (*cusped square*) за ротацију од 0.00 степени и са ротацијом узорка се мења прво у облик елипсе и на крају постаје круг. За одређени угао ротације кристала од око 0.05 степени долази до „интеракције“ унутрашње и спољашње линије дуге. Са друге стране спољни део линија дуге се не мења пуно са променом угла ротације. Дакле, анализа показује да ефекат *крофне* представља тамни део кружне линије дуге.



Слика 5.6. Експериментална еволуција угаоне расподеле каналисаних протона енергије 2 MeV кроз кристал Si^{14} дебљине 55 nm и одговарајућих теоријски добијених линија дуге.

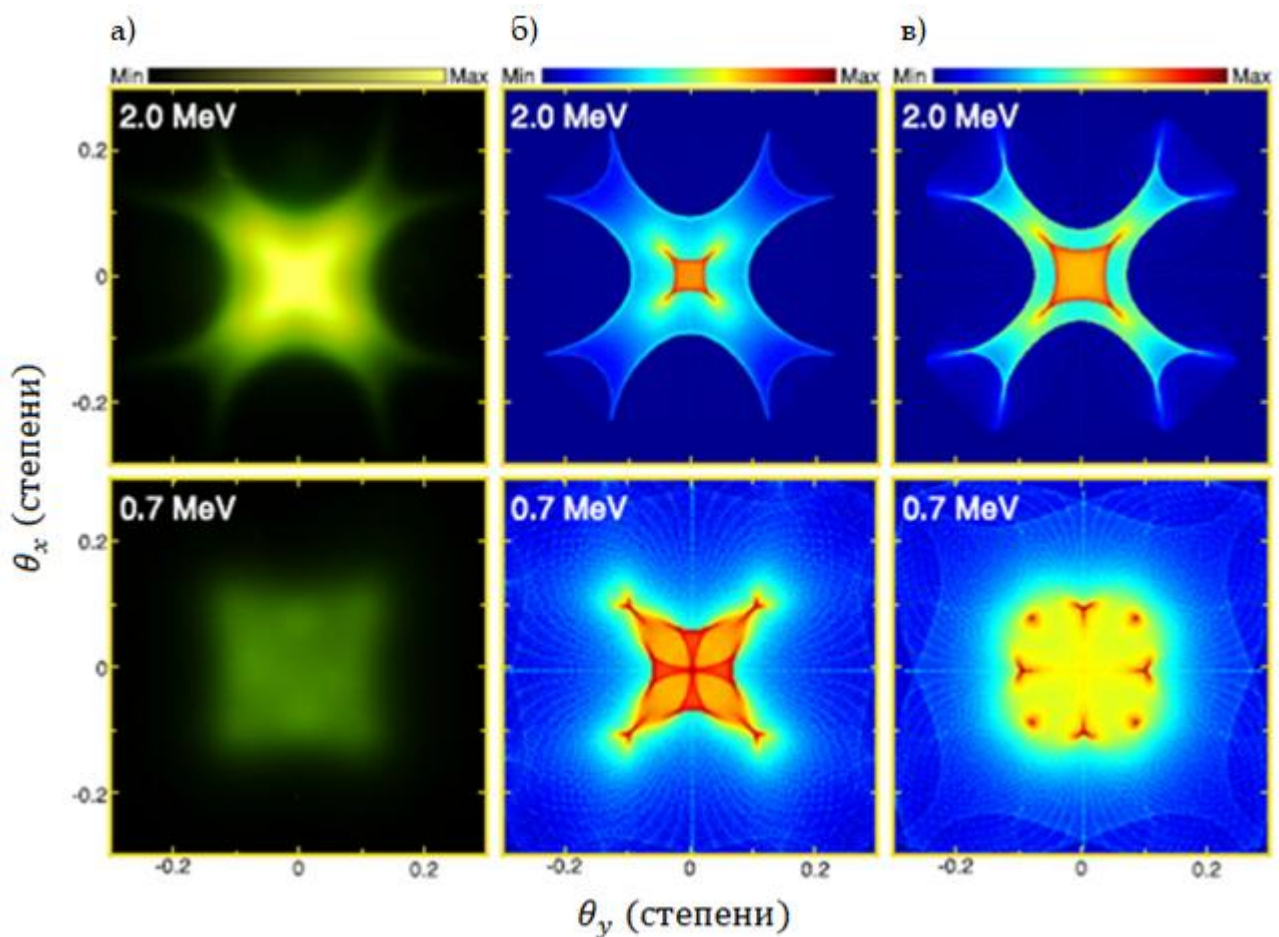


Слика 5.7. Еволуција линија дуге у равни ударног параметра у случајевима приказаним на слици 5.6.

Због велике прецизности ових мерења и коришћења ZBL потенцијала поставило се питање да ли и други потенцијали интеракције могу да успешно репродукују експерименталне резултате. Као што је напоменуто, група из *Oak Ridge* националне лабораторије је у својим симулацијама користила Молијеров потенцијал интеракције са Томас - Фермијевим радијусом екранирања који је добро описивао добијене експерименталне резултате за опсег енергија и дебљине кристала, тј. редуковане дебљине кристала који су мерени. Ова чињеница је указала на питање којим потенцијалом интеракције је могуће најпрецизније описати угаону расподелу каналисаних јона. Такође се поставило и питање да ли је могуће из морфолошке анализе добијених линија дуге и њиховим поређењем са експерименталним резултатима добити тачнији потенцијал интеракције протона и силицијума од горе наведених.

У следећем раду Сингапурска и Винчанска група су успеле да екстрактују веома тачан протон - силицијум потенцијал интеракције за каналисање при чему се показало да је секвенца угаоних расподела за различите енергије знатно боља за одређивање потенцијала интеракције него секвенца за различите углове ротације кристала (ефекат *крофне*). Ово ће бити илистовано касније у тексту [42]. На овај начин аутори су успели да конструишу дугин потенцијал интеракције, полазећи од модификованог Молијеровог потенцијала интеракције и увођењем Фирсове функције екранирања.

Из снимљених угаоних расподела каналисаних јона кроз (001) канале ултратанких мембрана силицијума дебљине 55 nm , у опсегу енергија протона од 0.7 MeV до 2 MeV и њиховим поређењем са одговарајућим теоријским расподелама са различитим потенцијалима интеракције аутори су приметили одређења слагања, односно неслагања. Захваљујући високој резолуцији експеримента било је могуће поредити облик одговарајућих теоријских и експерименталних расподела, тј. могуће је обавити морфолошку анализу. Ово је илустровано на слици 5.8.

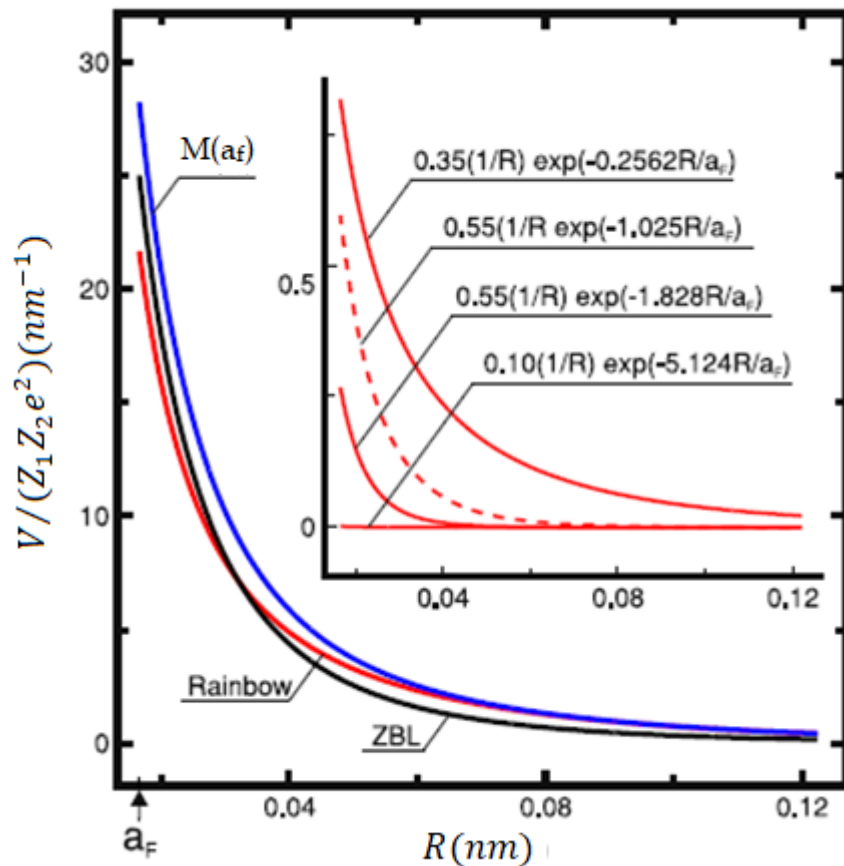


Слика 5.8. а) Експериментална угаона расподела каналисаних протона енергија 2 MeV и 0.7 MeV и њихове теоријски добијене расподеле помоћу FLUX симулационог кода са б) ZBL потенцијалом интеракције и в) Молијеровим потенцијалом интеракције.

Централни део расподеле јона за енергије од 2 MeV је облика квадрата шиљастих темена и у експерименту и у симулацији, с' тим што је помоћу Молијеровог потенцијала интеракције обим централног квадрата већи него коришћењем ZBL потенцијала интеракције. Може се закључити да је величина централног дела експерименталне расподеле ближа Молијеровом случају. Са друге стране спољни део теоријске расподеле за ову енергију коришћењем ZBL потенцијала боље описује експерименталну расподелу. Поред тога расподела за енергије од 0.7 MeV добијена са ZBL потенцијалом интеракције јасно показује максимум расподеле у централном углу, док експериментална и расподела добијена користећи Молијеров потенцијал имају минимум у централном углу! Одговарајућа теоријска расподела добијена коришћењем Молијеровог потенцијала интеракције има четири изражена максимума који леже на линијама $\theta_x = 0^\circ$ и $\theta_y = 0^\circ$ и четири слабија максимума који леже на линијама $\theta_x = -\theta_y$, што одговара расподели добијеној експерименталним мерењем. Треба истаћи да се међусобне позиције ових максимума морфолошки разликују (видети слику 5.8).

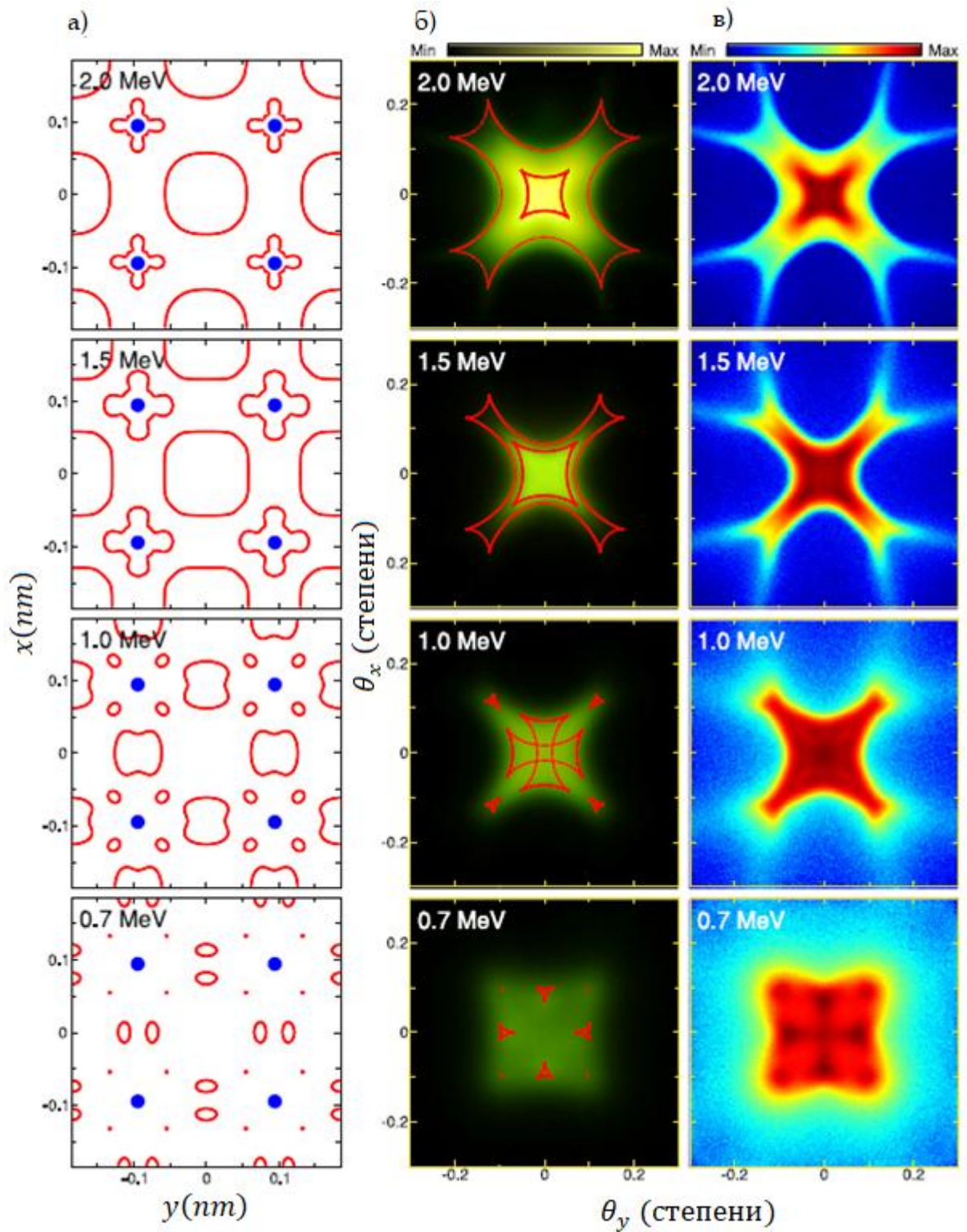
На основу ових поређења може се закључити да је ZBL потенцијал бољи за блиске сударе - мале ударне параметре, који одговарају спољашњем делу расподеле, док је Молијеров потенцијал бољи за веће ударне параметре, који одговарају централном делу расподеле. Аутори су претпоставили да је могуће модификовати

Молијеров потенцијал интеракције са Фирсовим радијусом екранирања, тако да он буде довољно прецизан у близини атомских низова, али без нарушавања његове прецизности у околини осе канала. Ова конструкција се заснивала на подешавању облика линија дуга у равни угла расејања минималним модификовањем Молијеровог потенцијала интеракције, што је оправдано због чињенице да је угаона расподела трансмитованих јона одређена одговарајућим дугиним линијама у равни угла расејања. На слици 5.9 показан је дугин – црвеном бојом, ZBL – црном бојом и Молијеров – плавом бојом потенцијал интеракције у зависности од растојања, односно ударног параметра протона у односу на атом силицијума.



Слика 5.9. Модификовање Молијеровог потенцијала интеракције са Фирсовом функцијом екранирања.

У убаченом делу слике приказане су три компоненте Молијеровог потенцијала који је модификован са намером да се добије дугин потенцијал интеракције. Модификација је обављена мењањем једног параметра фитовања. Добијени дугин потенцијал интеракције веома тачно описије добијене експерименталне угаоне расподеле за опсег енергије од 0.7 MeV до 2 MeV , што је показано на слици 5.10.

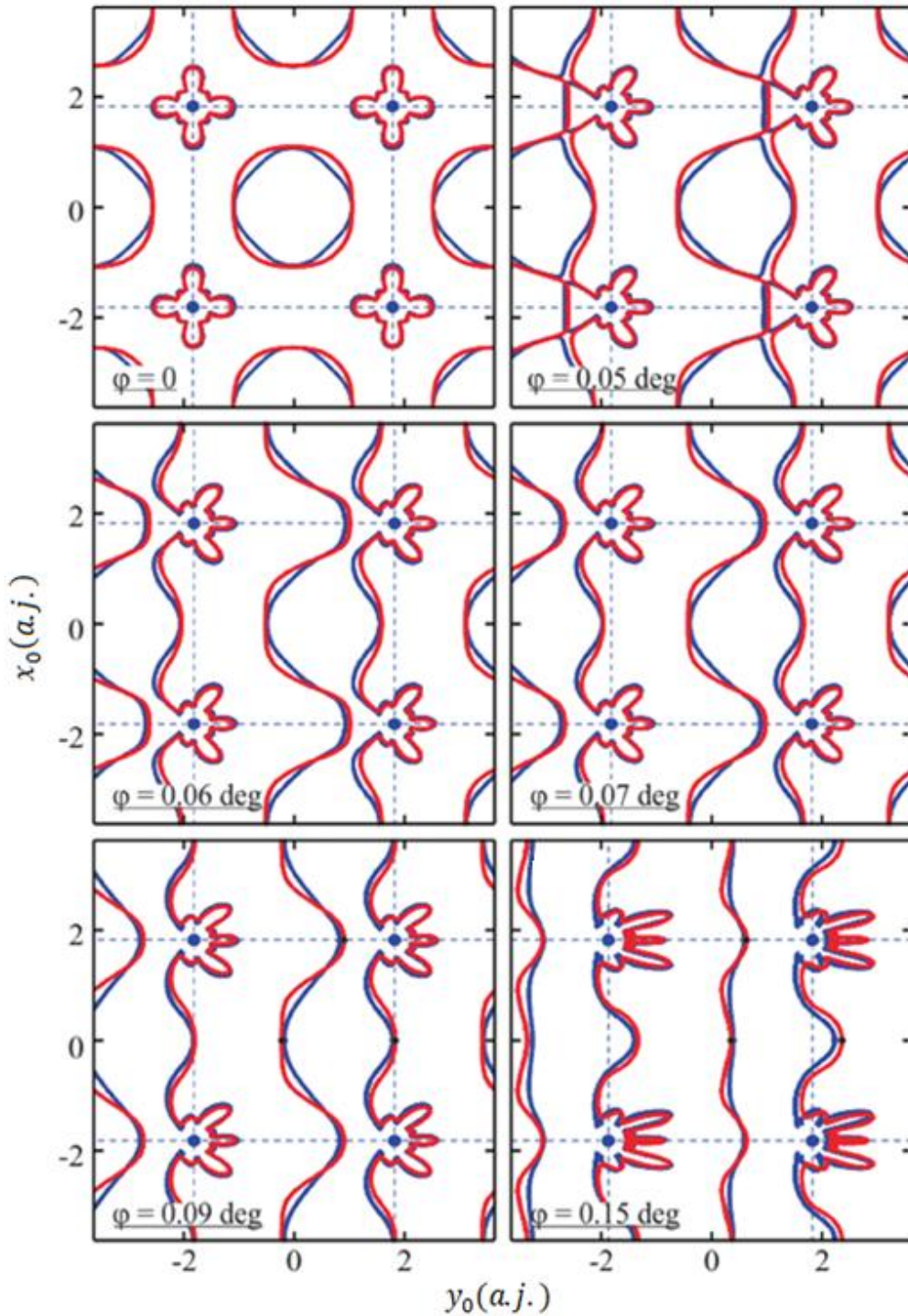


Слика 5.10. а) Линије дуге у равни ударног параметра добијене дугиним потенцијалом интеракције; б) поређење експерименталне угаоне расподеле и теоријски добијених линија дуге помоћу теорије кристалних дуга и дугиног потенцијала и в) добијена теоријска угаона расподела каналисаних јона помоћу *FLUX* симулационог кода са употребљеним дугиним потенцијалом.

На овај начин, Петровић са сарадницима [42] је успео да „залепи“ V_{ZBL} и V_M потенцијале интеракције мењајући параметар фитовања β'_2 у V_M^F потенцијалу интеракције, на параметар $\beta'_{ir} = (5.124, 1.828, 0.2562)$ и на тај начин је добијен

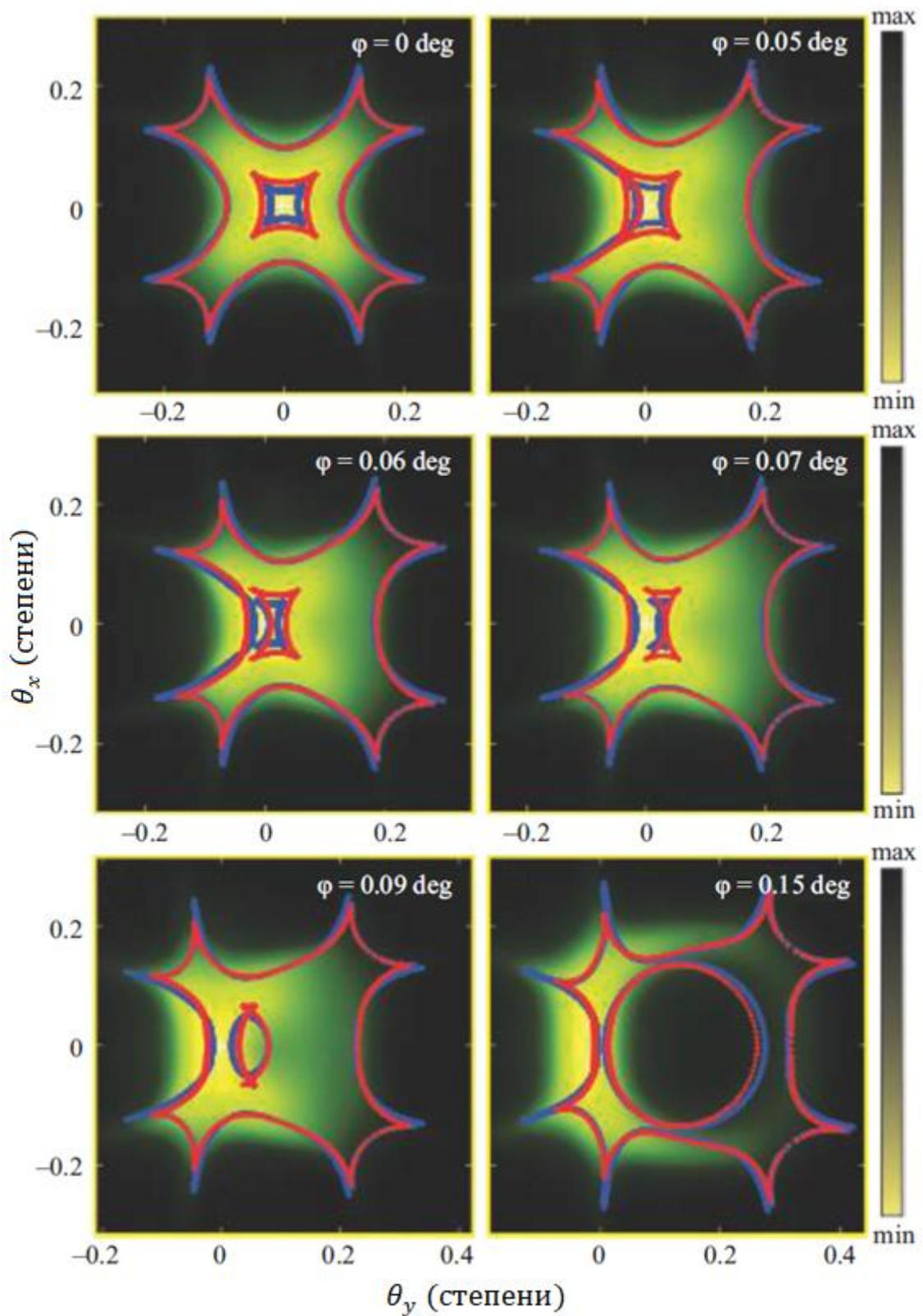
такозвани дугин V_{Mr}^F потенцијал интеракције, који је прецизан за све ударне параметре [54].

$$V_{Mr}^F(r/a_F) = (Z_1 Z_2 e^2 / r) \sum_{i=1}^3 \alpha_i \exp(-\beta_{ir}' r / a_F) \quad 5.1$$



Слика 5.11. : Еволуција линија дуге у равни ударног параметра за протоне енергије 2 MeV каналисаних кроз 55 nm дебео кристал силицијума оријентације (001) заротираниог од $[100]$ правца за углове од 0.00, 0.05, 0.06, 0.07, 0.09 и 0.15 степени; дугин потенцијал – црвена линија, ZBL потенцијал – плава линија.

Слика 5.11 приказује линије дуге у равни ударног параметра за протоне енергије 2 MeV каналисане кроз 55 nm дебео кристал силицијума оријентације (001) заротиран од [100] правца. Углови ротације φ су 0.00, 0.05, 0.06, 0.07, 0.09 и 0.15 степени. Црвена линија представља линију добијену коришћењем V_{Mr}^F потенцијала, док плава линија представља линију добијену коришћењем ZBL потенцијала интеракције. Јасно је да се ове линије веома добро слажу у близини атомских низова, за мале ударне параметре, а да се разликују за велике ударне параметре. Такође је веома јасно да две раздвојене линије, за случај без ротације узорка ($\varphi = 0$), око центра канала и око атомских низова, за углове ротације веће од око 0.05 степени „интерагују“ међусобно након чега се поново раздвајају. За веће углове ротације једна линија је локализована око и између атомских низова, док је друга локализована око центра канала и између атомских низова.



Слика 5.12. Еволуција линија дуге у равни угла трансмисије које одговарају слици 5.11; дугин потенцијал – црвена линија; ZBL потенцијал – плава линија.

Линије дуге у равни угла трансмисије које одговарају линијама дуге приказаним на слици 5.11 су приказане на слици 5.12. На овој слици су такође приказане и одговарајуће експерименталне угаоне расподеле. За случај без ротирања, дугин потенцијал интеракције очигледно боље репродукује

експерименталне резултате, нарочито за унутрашњу линију око центра канала. Такође је веома јасно да спољашња линија дуге добијена помоћу V_{Mr}^F потенцијала интеракције боље репродукује експерименталне резултате, што је нарочито уочљиво за угао ротације од $\varphi = 0.05$ степени. Занимљиво је приметити да оба потенцијала интеракције квалитативно на исти начин приказују како се ефекат крофне формира. Наиме, након интеракције горе поменуте две линије дуге, унутрашња линија доживљава еволуцију из облика затворене линије са четири шиљка у темену у круг. Ова чињеница се може приписати добро познатој структурној стабилности сингуларности пресликавања [55]. Даље се може тврдити да је ова дуга кружног облика.

У овом раду [54] је показано да дугин протон - силицијум потенцијал интеракције веома добро апроксимира формацију крофне која се јавља у експерименталним угаоним расподелама протона енергије 2 MeV каналисаних кроз 55 nm дебео кристал силицијума оријентације (001) заротиран од правца [100]. Са друге стране јасно показује зашто секвенца угаоних расподела, где се мења угао закретања, не би била погодна за процедуру добијања дугиног потенцијала интеракције.

На основу овако конструисаног потенцијала интеракције за случај протона и кристала силицијума Si^{14} , поставило се питање да ли се иста методологија може применити и на друге кристале. Ово је основна тема дисертације где су представљени резултати морфолошког испитивања каналисања јона кроз различите кубне кристале и њихова употреба у конструисању универзалног дугиног потенцијала интеракције.

6. УНИВЕРЗАЛНИ ДУГИН ПОТЕНЦИЈАЛ ИНТЕРАКЦИЈЕ У СЛУЧАЈУ КВАДРАТНИХ КАНАЛА КУБНИХ КРИСТАЛА

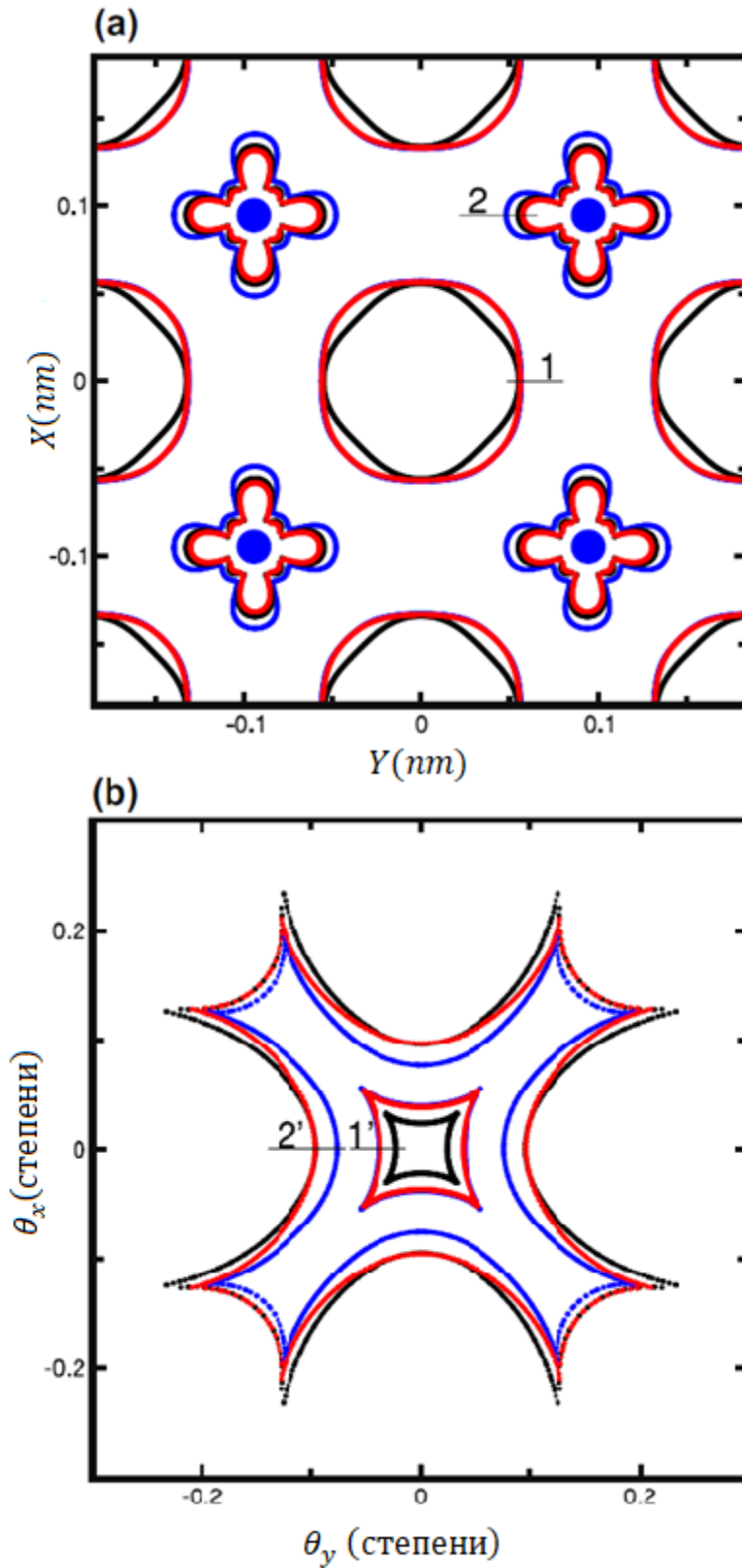
Анализираћемо каналисање протона енергија 2 MeV и следећих 28 кристала оријентације (001) са кубном кристалографском структуром. Са *FCC* кристалографском структуром: алуминијум Al^{13} , калцијум Ca^{20} , никл Ni^{28} , бакар Cu^{29} , стронцијум Sr^{38} , родијум Rh^{45} , паладијум Pd^{46} , злато Au^{79} , олово Pb^{82} и торијум Th^{90} ; са *BCC* кристалографском структуром: ванадијум V^{23} , хром Cr^{24} , гвожђе Fe^{26} , ниобијум Nb^{41} , молибден Mo^{42} , баријум Ba^{56} , еуропијум Eu^{63} , танталијум Ta^{73} и волфрам W^{74} ; и са дијамантском кристалографском структуром: угљеник C^6 , силицијум Si^{14} , германијум Ge^{32} и калај Sn^{50} .

Као што је већ напоменуто, Петровић и сарадници [42] су успели да „залепе“ два потенцијала интеракције, ZBL и Молијеров, мењајући само параметар фитовања δ_2' тако да су добијени нови параметри $\delta_i'' = (5.124, 1.828, 0.2562)$.

Циљ овог поглавља доктората је примена исте методе за протоне енергија 2 MeV и поменутих 28 кубних кристалографских кристала. Метод се заснива на процедури фитовања, у којима линије дуге у равни угла расејања генерисане коришћењем ZBL потенцијала интеракције, које одговарају малим ударним параметрима протона, треба да се пореде са одговарајућим линијама дуге добијеним са дугиним потенцијалом интеракције за каналисање, а у исто време, линије дуге у равни угла расејања генерисане са Молијеровим потенцијалом интеракције, за велике ударне параметре, треба поредити са линијама дуге генерисаним помоћу истог дугиног потенцијала интеракције за каналисање. Морфолошка анализа експерименталних и теоријских резултата је показала да је ово могуће постићи [42] и да се може говорити о универзалном аксијалном (001) дугином потенцијалу интеракције за каналисање. Према резултатима из заједничког рада Сингапурске и Винчанске групе [42], у првој апроксимацији параметри фитовања δ_1'' и δ_3'' су третирани као константни и једнаки 5.124 и 0.2562, респективно, што подразумева да је радијус екранирања исти за све квадратне канале и одговара случају протона и силицијума. Метод за подешавање параметра δ_2'' се састоји од минимизације израза:

$$d^2 = d_1^2 + d_2^2 = (\theta_{xr1} - \theta_{xZBL1})^2 + (\theta_{xr2} - \theta_{xM2})^2 \quad 6.1$$

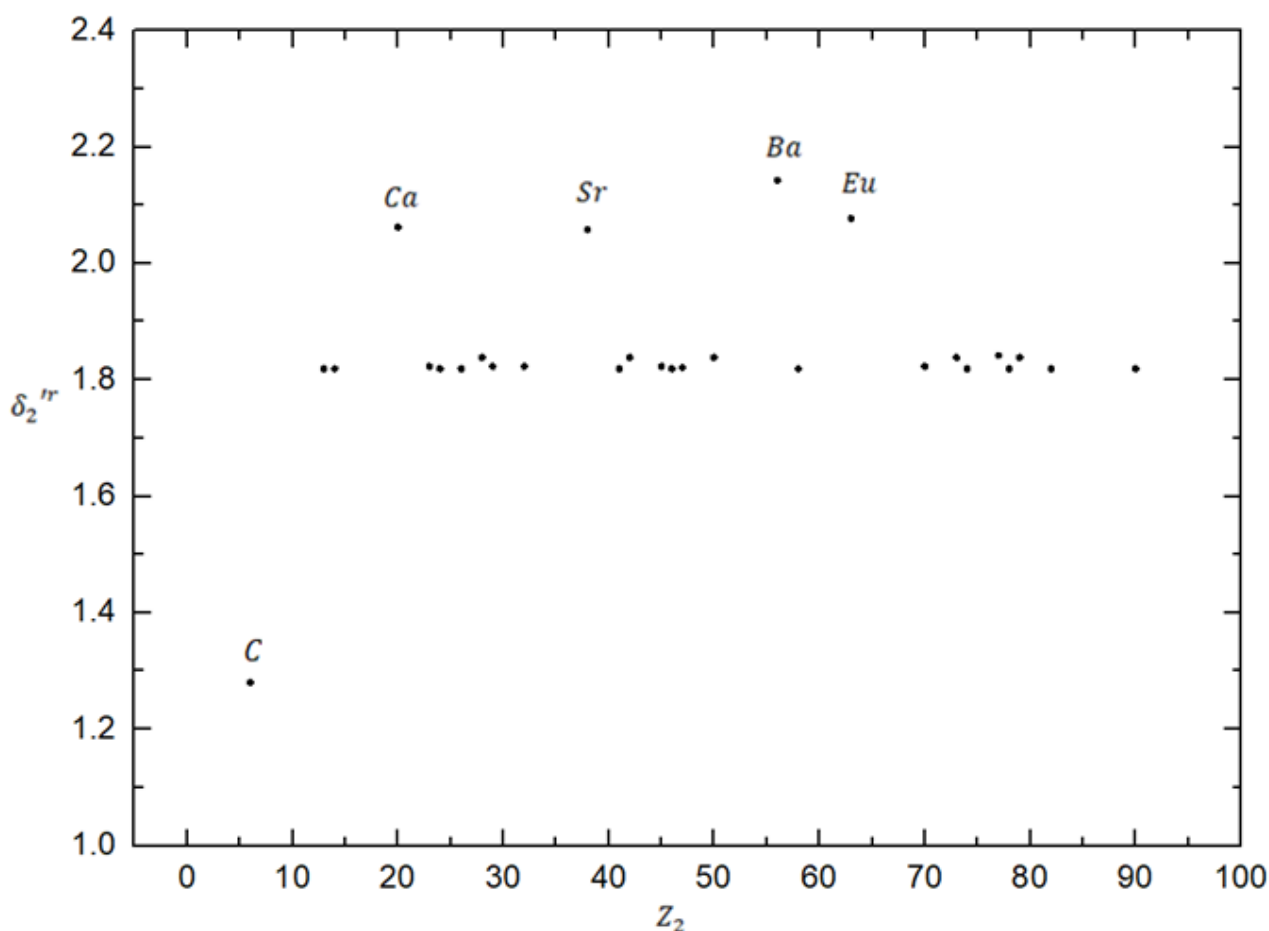
где су θ_{xr1} и θ_{xr2} пресеци линија дуге у равни угла расејања са линијом $\theta_y = 0$, који одговарају дугином потенцијалу интеракције за спољашњу и унутрашњу линију, респективно, док су θ_{xZBL1} и θ_{xM2} пресеци линија дуге у равни угла расејања са линијом $\theta_y = 0$ који одговарају ZBL и Молијеровом потенцијалу за спољашњу и унутрашњу линију дуге, респективно. Ове тачке су слика одговарајућих тачака у равни ударног параметра X_{0r1} , X_{0r2} , X_{0ZBL1} и X_{0M2} , респективно. Ово је илустровано на слици 6.1 у случају кристала силицијума дебљине 55 nm и протона енергије 2 MeV [42].



Слика 6.1. Линије дуге у: а) равни ударног параметра и б) равни угла расејања, добијене помоћу ZBL - црна линија, Молијеровог - плава линија и дугиног - црвена линија потенцијала интеракције за протоне енергија 2 MeV каналисаних кроз ултратанки силицијум Si^{14} дебљине 55 nm , оријентације (001).

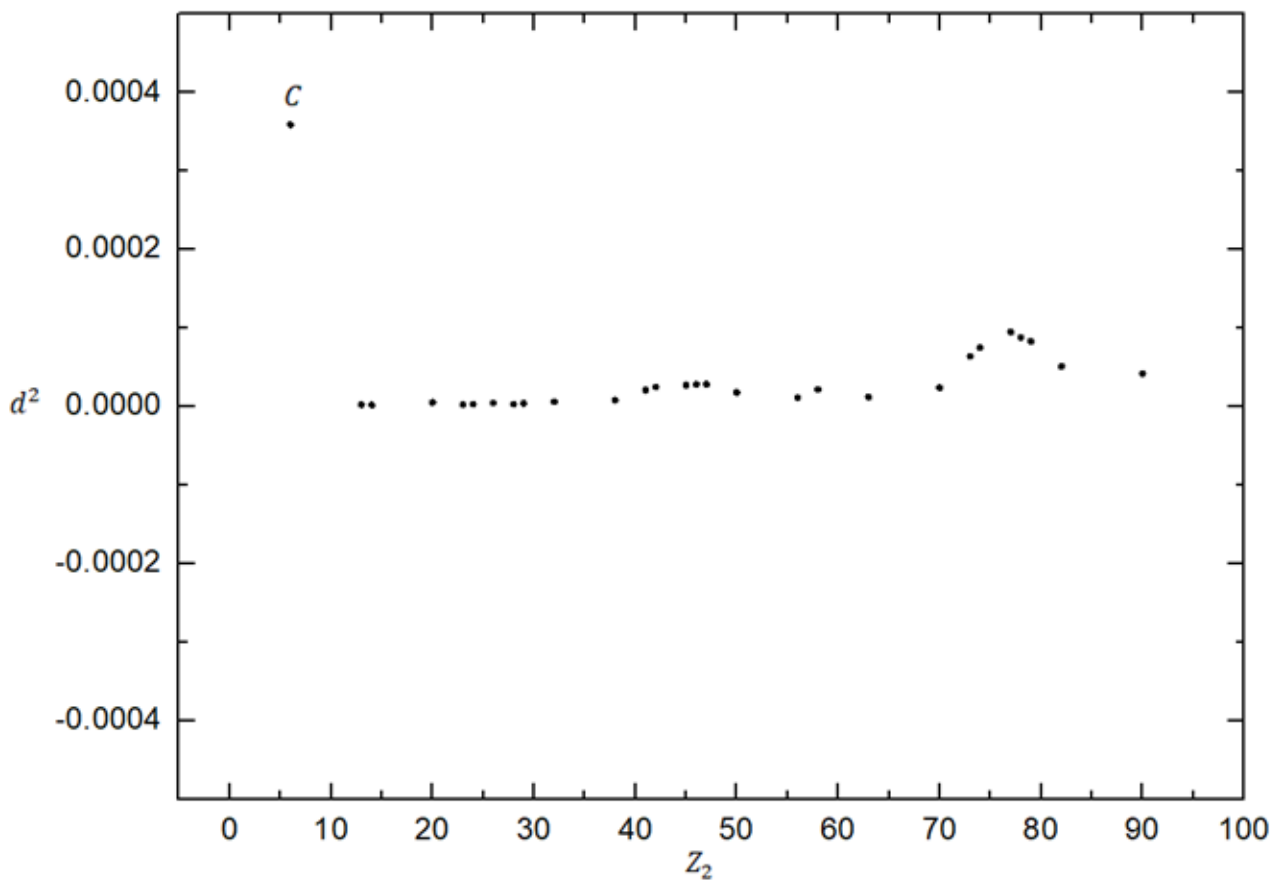
Тачка 1 на слици 6.1 (а) одговара тачкама X_{0r1} и X_{0ZBL1} , тачка 2 на слици 6.1 (а) одговара тачкама X_{0r2} и X_{0M2} , док тачка 1' на слици 6.1 (б) одговара тачкама θ_{xr1} и θ_{xZBL1} , а тачка 2' на слици 6.1 (б) одговара тачкама θ_{xr2} и θ_{xM2} .

Слика 6.2 показује зависност добијеног параметра фитовања δ_2'' од атомског броја кристала Z_2 [56]. Минимална вредност параметра фитовања δ_2'' је 1.50 за угљеник C^6 , док је максимална вредност 2.14 за баријум Ba^{56} . Добијена средња вредност за параметар фитовања δ_2'' је 1.85 са стандардном девијацијом 0.12. Из добијених резултата за параметар фитовања δ_2'' може се видети да елементи: калцијум Ca^{20} , стронцијум Sr^{38} , баријум Ba^{56} и еуропијум Eu^{63} формирају групу елемената са параметром фитовања δ_2'' већим од просека, средње вредности 2.08 и стандардном девијацијом 0.04. Са друге стране, за остала 23 елемента, без угљеника C^6 , средња вредност параметра фитовања δ_2'' је једнака 1.83 са стандардном девијацијом од 0.01.



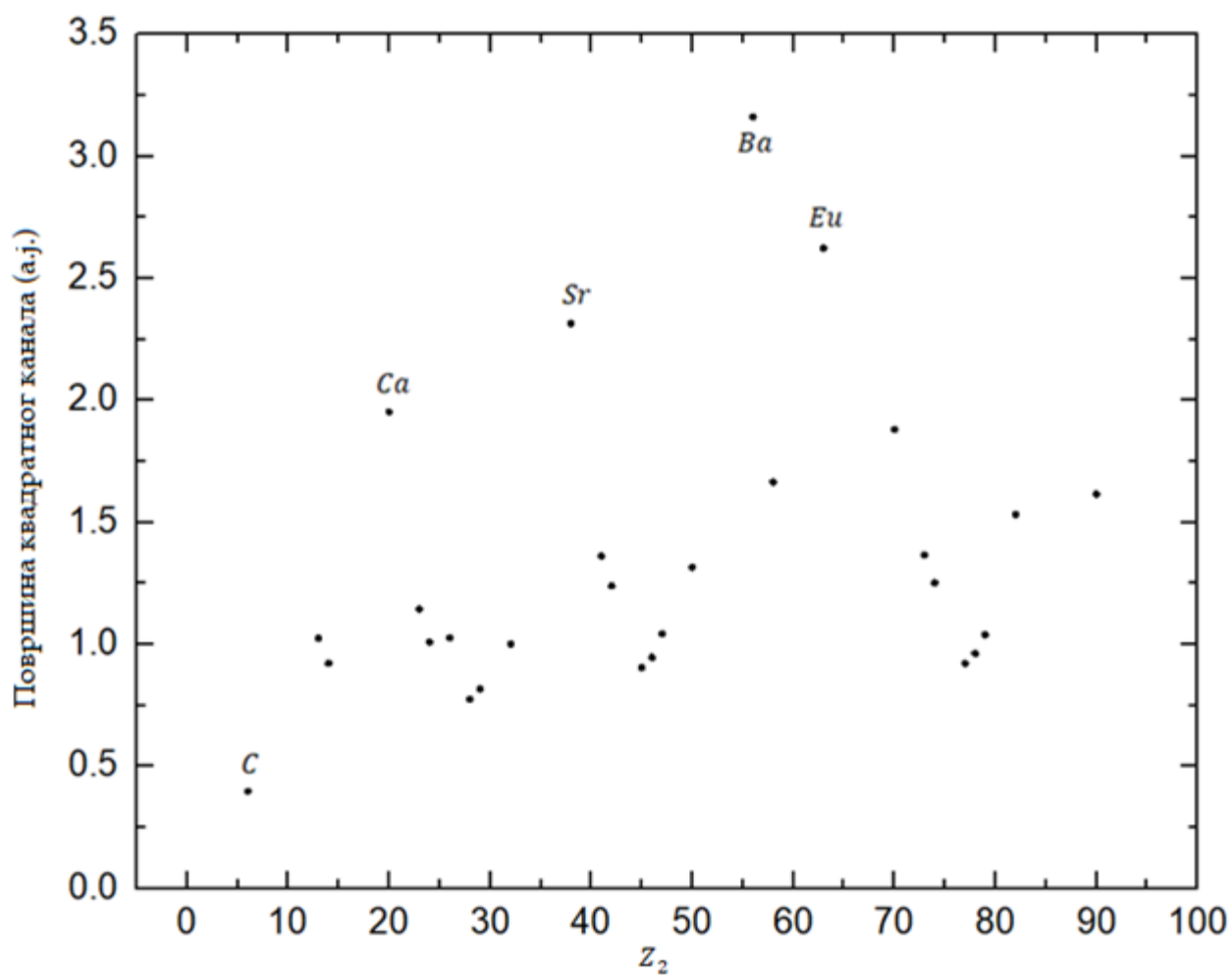
Слика 6.2. Зависност параметра фитовања δ_2'' од атомског броја кристала Z_2 .

За све атомске бројеве вредност параметра d_1 и d_2 су практично једнаки нули. Једини изузетак је угљеник C^6 .

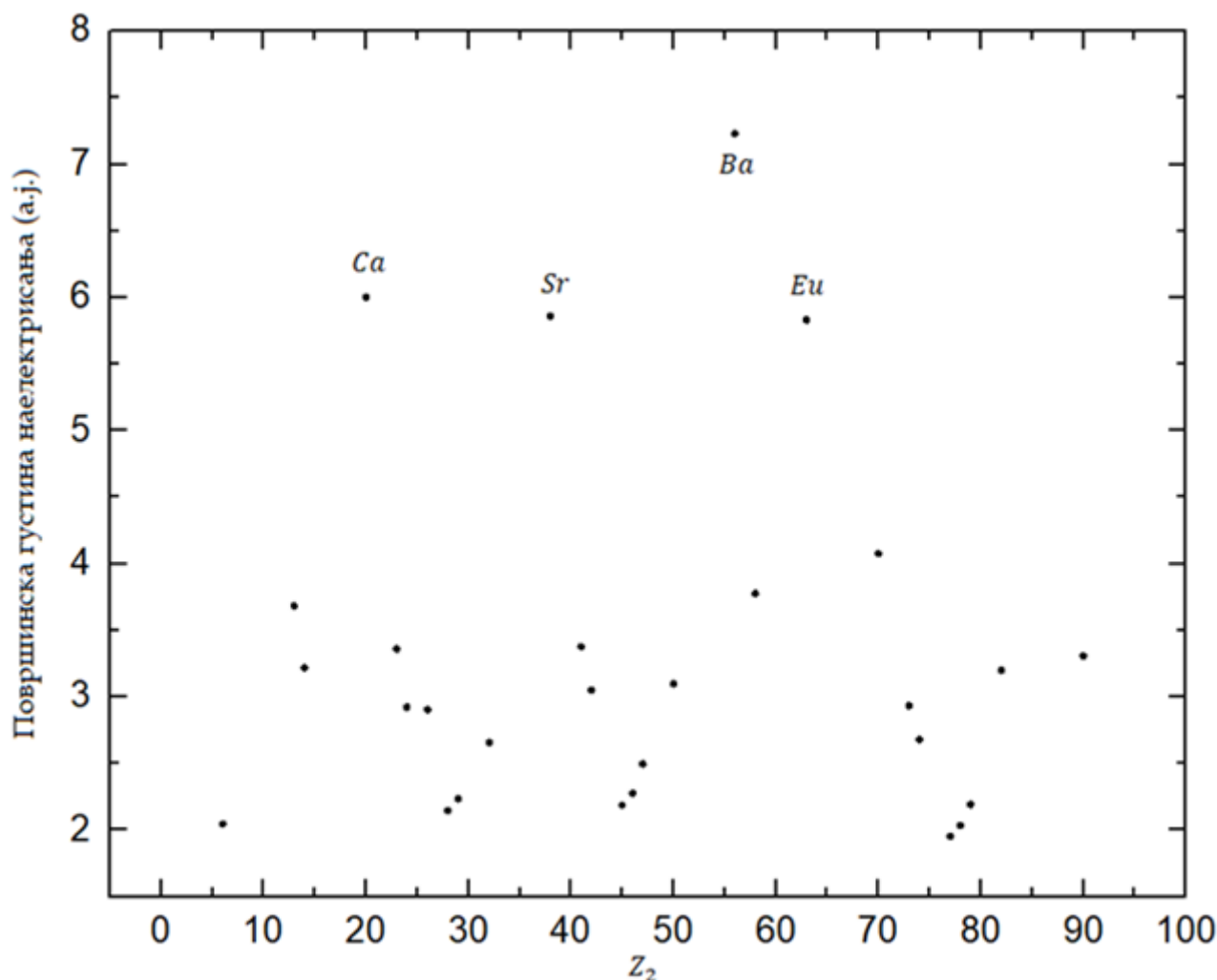


Слика 6.3. Зависност параметра d^2 од атомског броја кристала Z_2 .

Понашање параметра фитовања δ_2'' је у очитој корелацији са површином квадратног (001) канала, односно површинском густином наелектирсања квадратног канала кристала и његовог атомског броја Z_2 , за елементе који су узети у обзир. Ова зависност је приказана на сликама 6.4 и 6.5, респективно.



Слика 6.4. Зависност површине квадратног канала кристала (а.ј.) од атомског броја Z_2 .



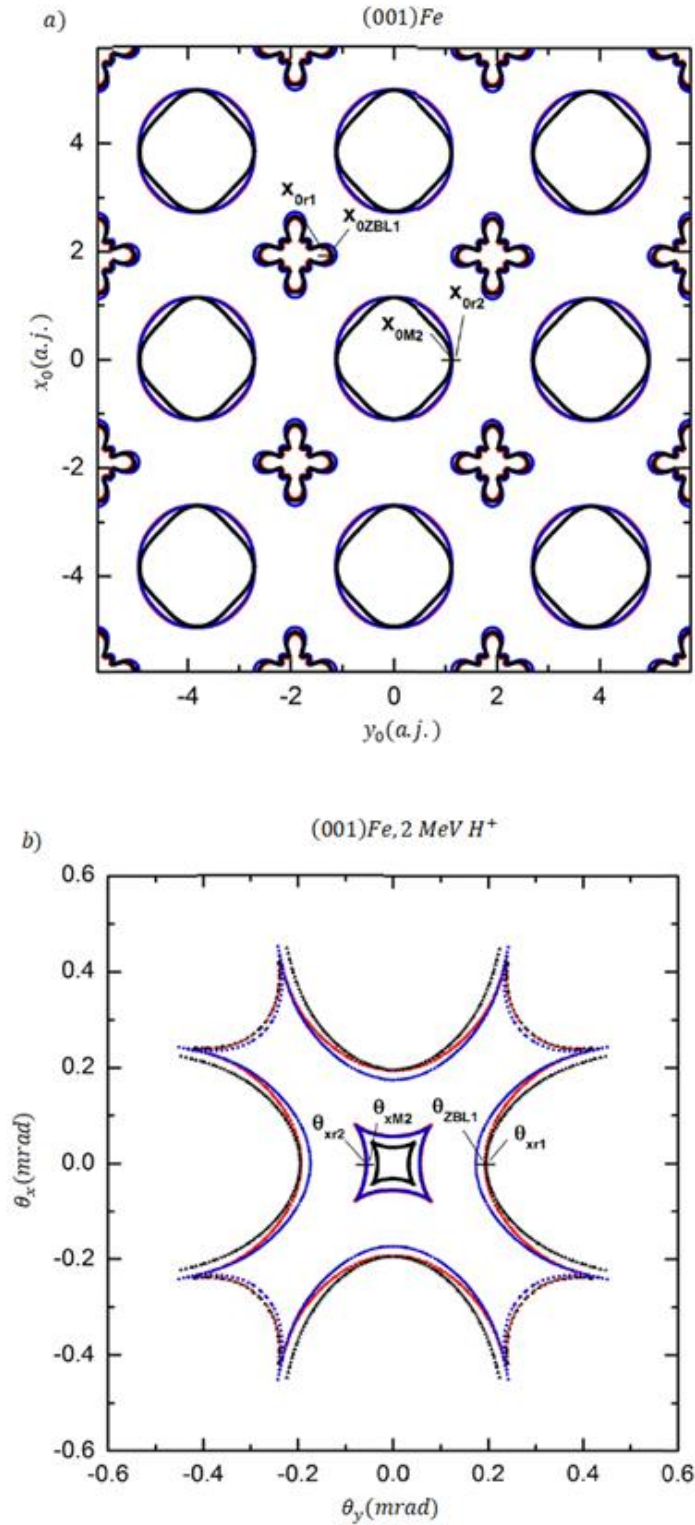
Слика 6.5. Зависност површинске густине наелектрисања квадратног канала кристала (а.ј.) од атомског броја кристала Z_2 .

Ипак и поред тога, прилично је изненађујуће и запањујуће да је могуће добити дугин универзални потенцијал интеракције, коме су параметри фитовања $\delta_i'' = (5.124, 1.85, 0.2562)$, са стандардном девијацијом параметра δ_2'' од 6% (укључујући угљеник C^6). Ова чињеница имплицитно оправдава претпоставку да тачан универзални дугин потенцијал интеракције треба да апроксимира ZBL потенцијал интеракције за мале ударне параметре и Молијеров потенцијал интеракције за велике ударне параметре.

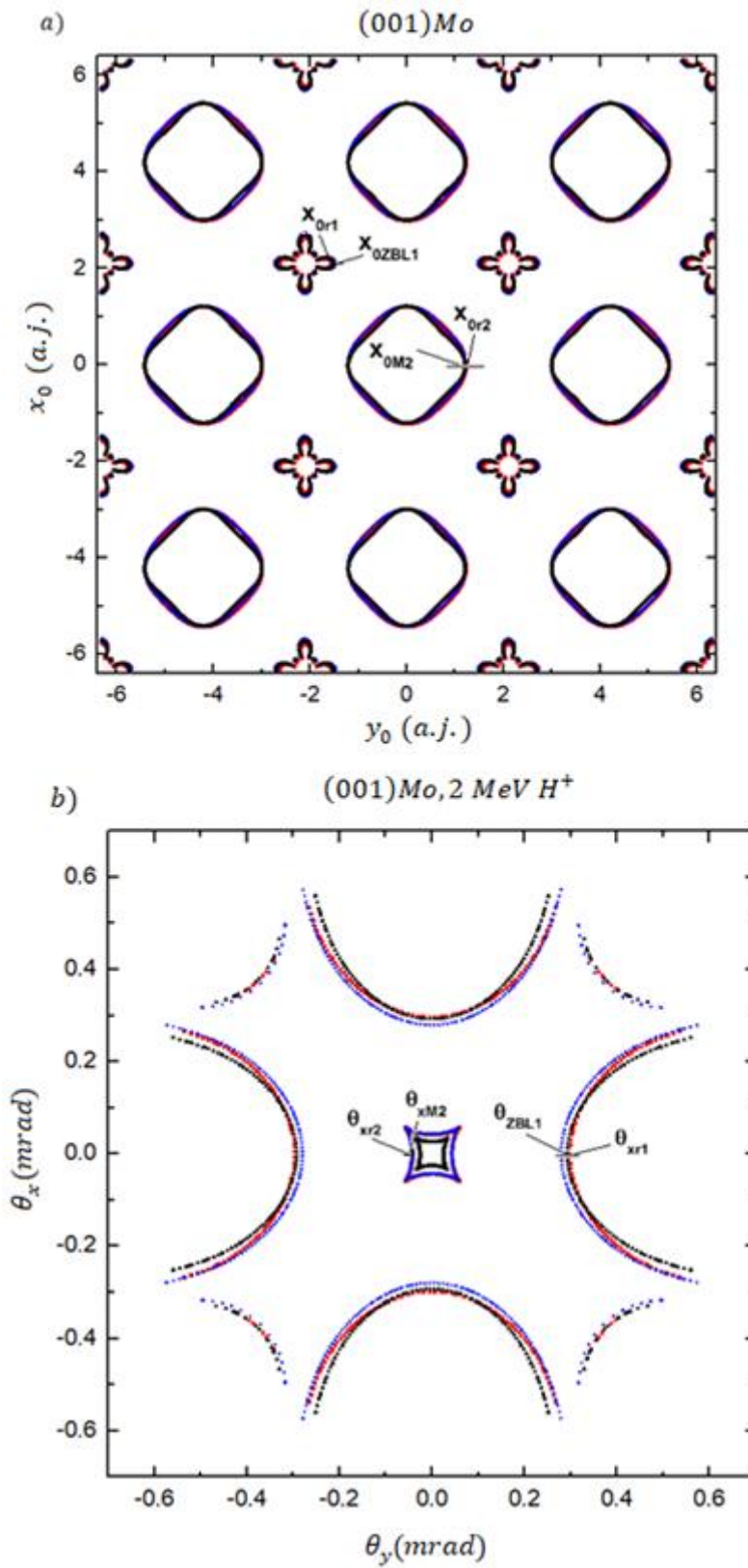
Даље у тексту ће бити показани резултати каналисања протона енергије 2 MeV и добијене линије дуга кроз квадратне канале три врсте кубних кристалографских кристала и то за: *BCC* кристалографску структуру, *FCC* кристалографску структуру и дијамантску кристалографску структуру. Кристали су изабрани тако да илуструју универзалност добијеног дугиног потенцијала интеракције.

На сликама 6.6, 6.7 и 6.8 су приказане линије дуге у равни ударног параметра и равни угла расејања за ZBL потенцијал интеракције – црна линија, Молијеров потенцијал интеракције – плава линија и дугин потенцијал интеракције – црвена линија, за протоне енергије 2 MeV каналисане кроз *BCC* кристале гвожђа Fe^{32} , молибдена Mo^{42} и еуропијума Eu^{63} оријентације (001) у односу на правац снопа

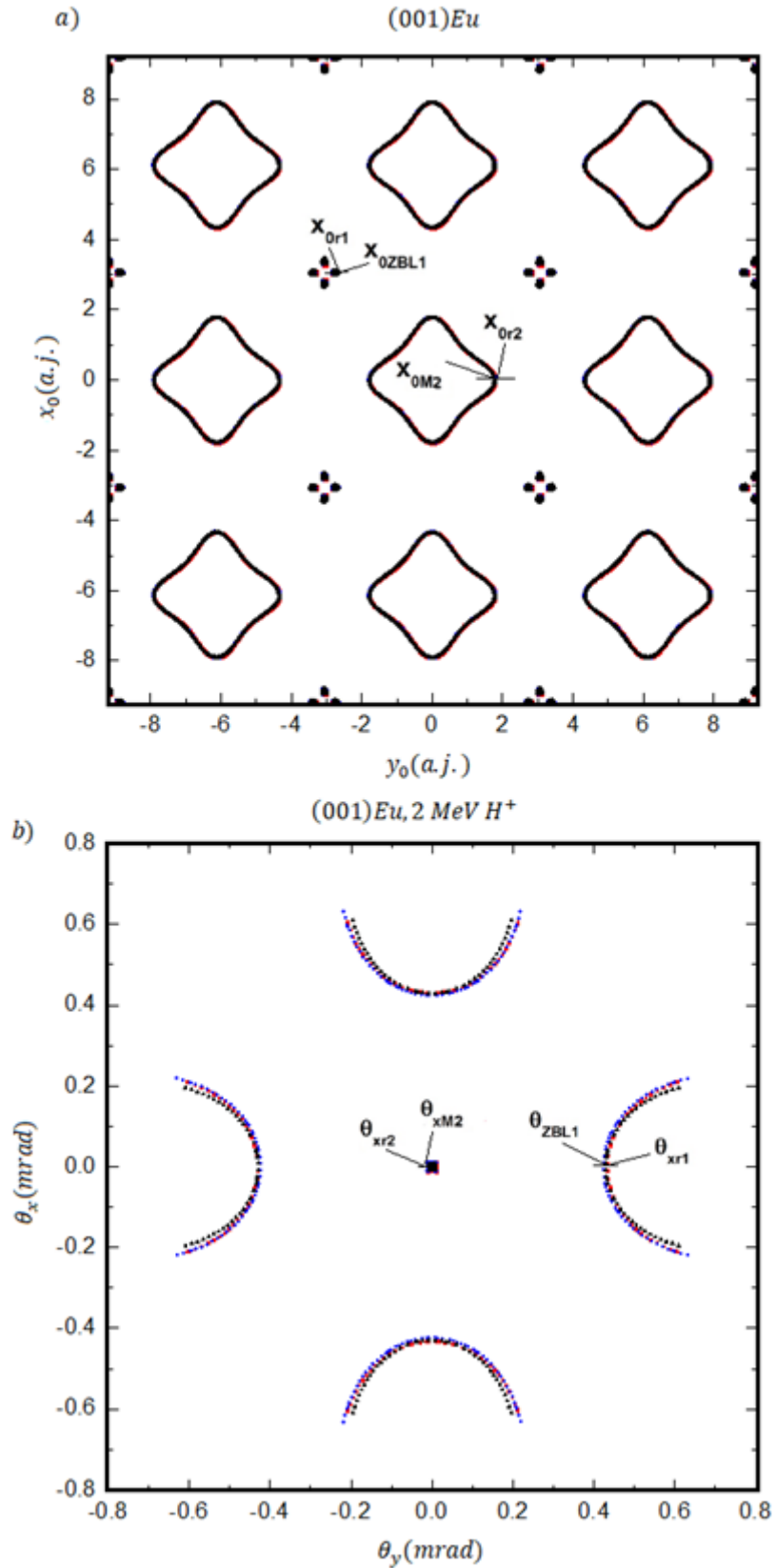
протона. Ова три кристала су изабрана због њихове велике разлике у величини квадратног канала и површинској густини наелектрисања. Дебљина кристала гвожђа Fe^{32} је 32 nm , молибдена Mo^{42} 27 nm и кристала еуропијума Eu^{63} 33 nm . Добијена вредност параметра δ_2'' за гвожђе Fe^{32} је 1.82, за молибден Mo^{42} 1.838 и за еуропијум Eu^{63} 2.077.



Слика 6.6. Линеје дуге у: а) равни ударног параметра и б) равни угла расејања, за ZBL потенцијал интеракције - црна линија, Молијеров потенцијал интеракције - плава линија и дугин потенцијал интеракције - црвена линија, за протоне енергије 2 MeV каналисане кроз кристал гвожђа Fe^{32} оријентације (001).

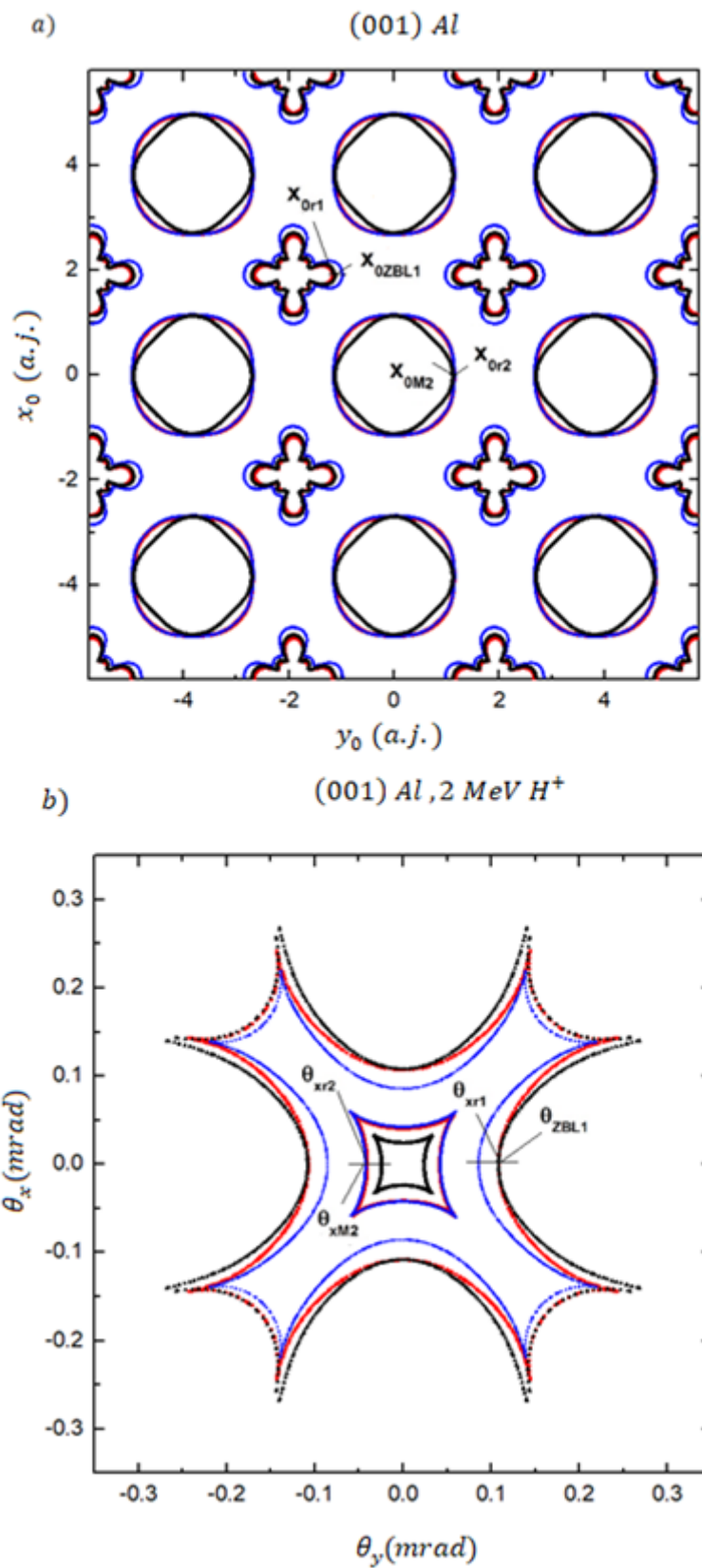


Слика 6.7. Линије дуге у а) равни ударног параметра и б) равни угла расејања, за ZBL потенцијал интеракције - црна линија, Молијеров потенцијал интеракције - плава линија и дугин потенцијал интеракције - црвена линија, за протоне енергије $2 MeV$ каналисане кроз кристал молибдена Mo^{42} оријентације (001) .

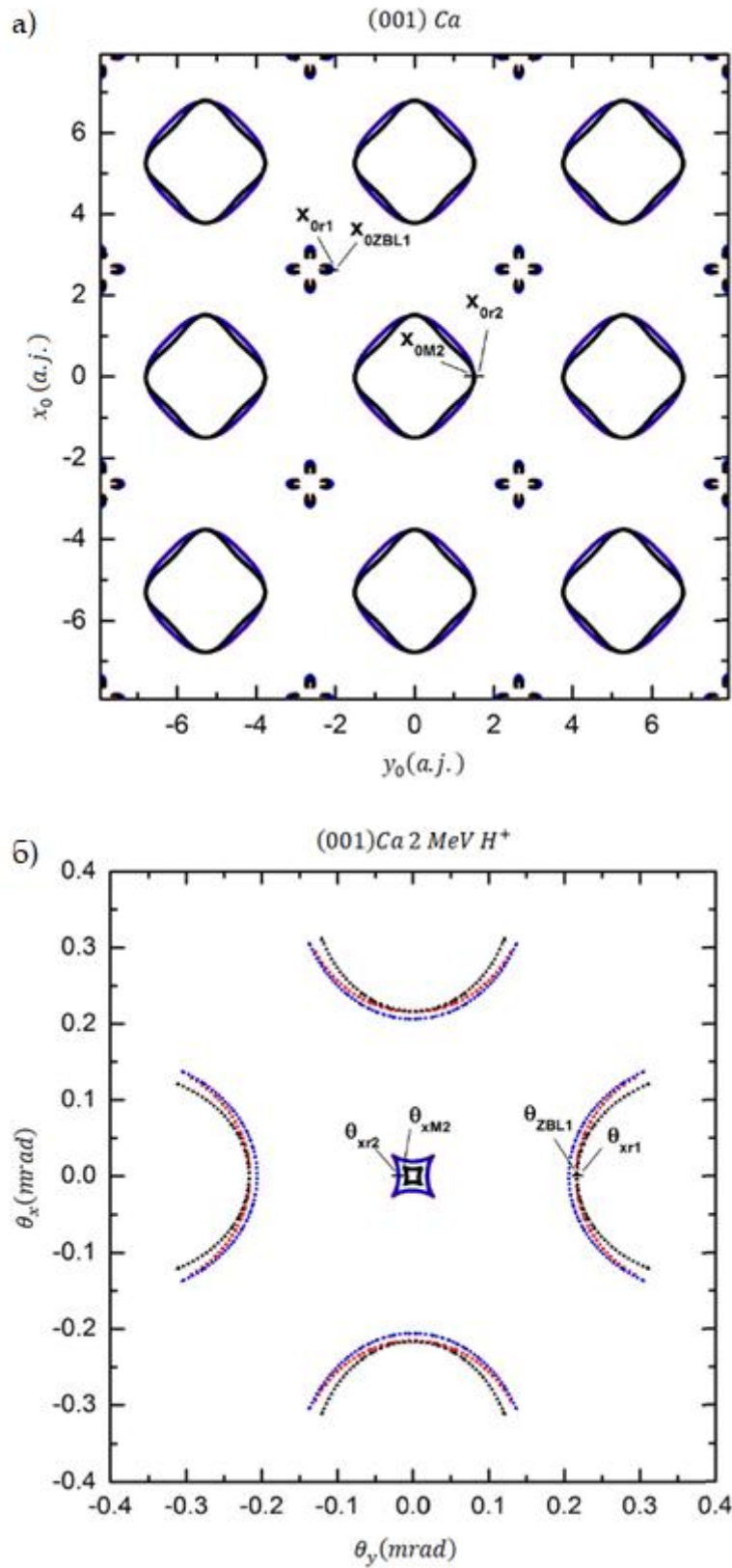


Слика 6.8. Линеје дуге у а) равни ударног параметра и б) равни угла расејања, за ZBL потенцијал интеракције - црна линија, Молијеров потенцијал интеракције - плава линија и дугин потенцијал интеракције - црвена линија, за протоне енергије 2 MeV каналисане кроз кристал еуропијума Eu^{63} оријентације (001).

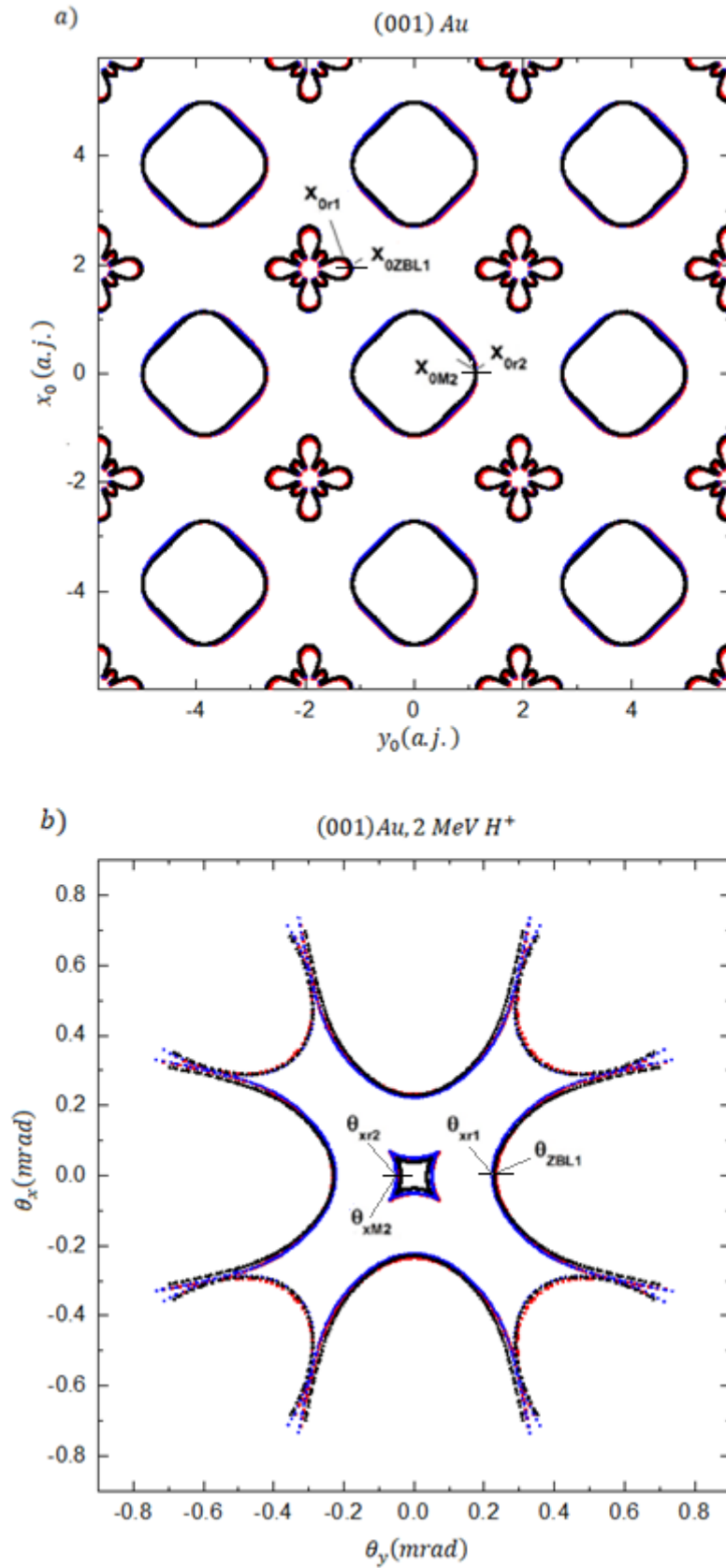
На сликама 6.9, 6.10 и 6.11 су приказане линије дуге у равни ударног параметра и равни угла расејања за ZBL потенцијал интеракције - црна линија, Молијеров потенцијал интеракције - плава линија и дугин потенцијал интеракције - црвена линија, за протоне енергије 2 MeV каналисане кроз FCC кристале алуминијума Al^{13} , калцијума Ca^{20} и злата Au^{79} оријентације (001) у односу на правац снопа протона. Као и у случају BCC кубних кристала ова три кристала су изабрана због њихове велике разлике у величини квадратног канала и површинској густини наелектрисања. Дебљина кристала алуминијума Al^{13} је 51 nm , кристала калцијума Ca^{20} 52 nm и кристала злата Au^{79} је 33 nm . Добијена вредност параметра δ_2'' за алуминијум Al^{13} је 1.829, за калцијум Ca^{20} 2.05 и за злато Au^{79} 1.838.



Слика 6.9. Линије дуге у а) равни ударног параметра и б) равни угла расејања, за ZBL потенцијал интеракције – црна линија, Молијеров потенцијал интеракције – плава линија и дугин потенцијал интеракције – црвена линија, за протоне енергије 2 MeV каналисане кроз кристал алуминијума Al^{13} оријентације (001).

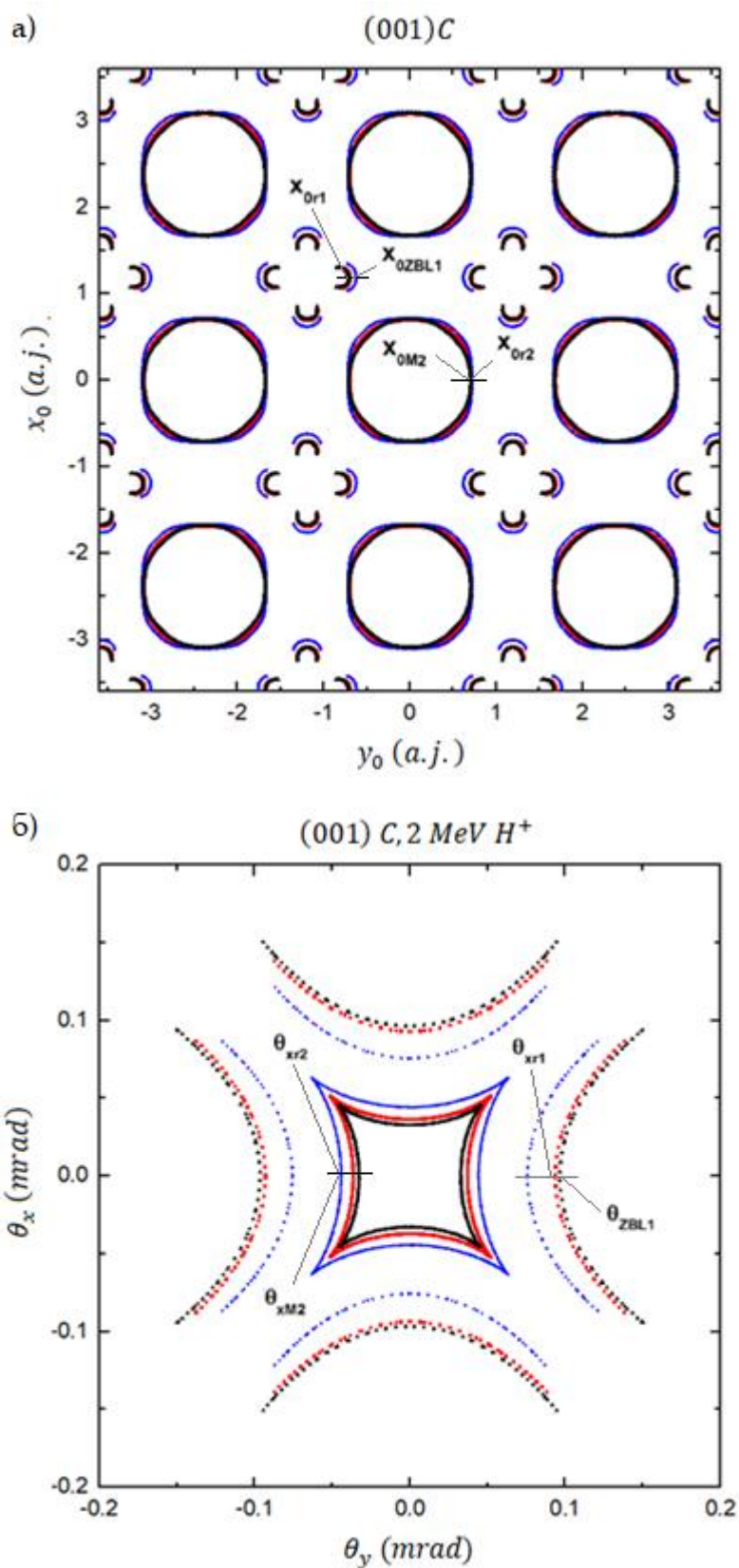


Слика 6.10. Линије дуге у а) равни ударног параметра и б) равни угла расејања, за ZBL потенцијал интеракције – црна линија, Молијеров потенцијал интеракције – плава линија и дугин потенцијал интеракције – црвена линија, за протоне енергије 2 MeV каналисане кроз кристал калцијума Ca^{20} оријентације (001).

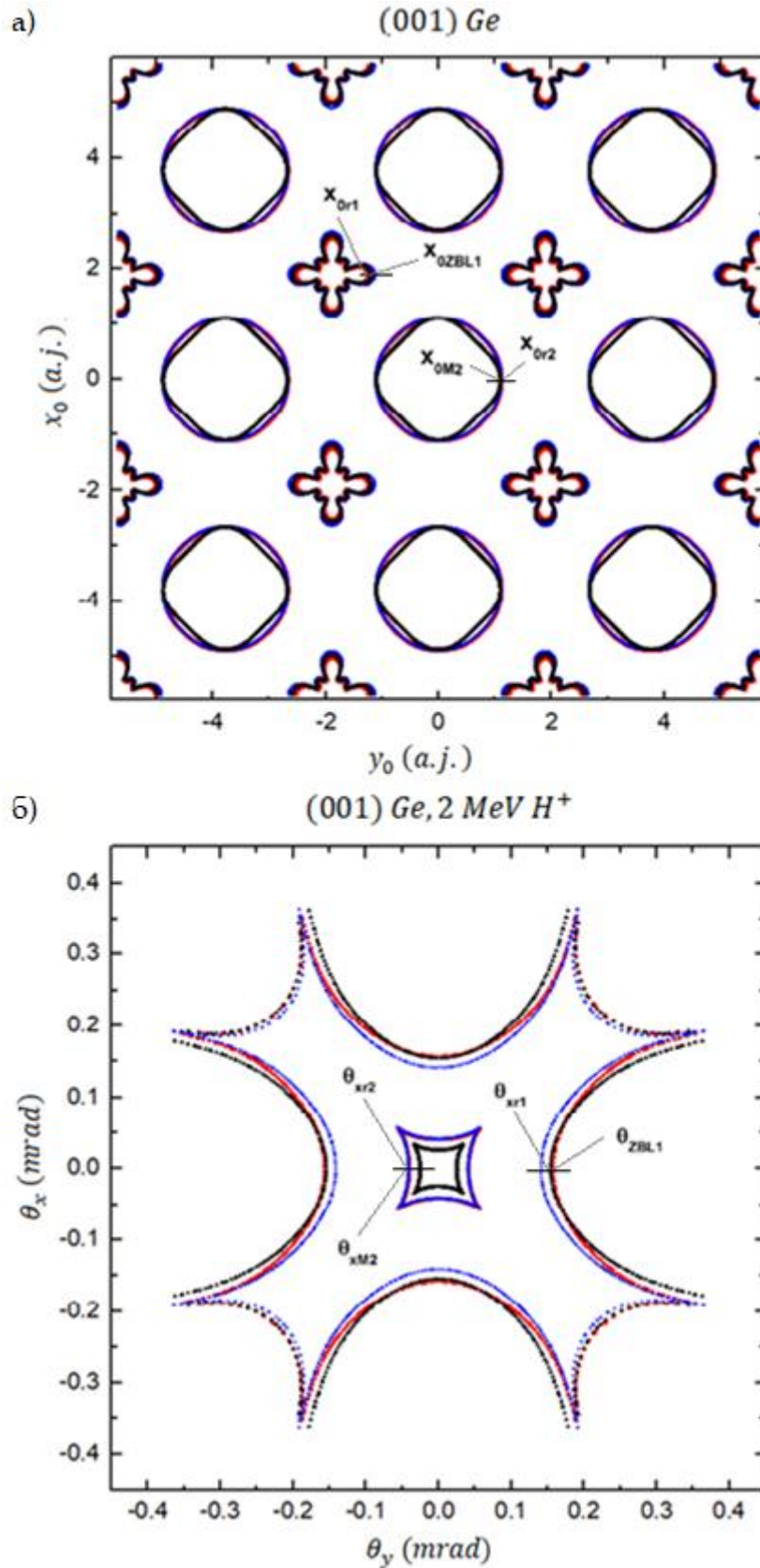


Слика 6.11. Линије дуге у а) равни ударног параметра и б) равни угла расејања, за ZBL потенцијал интеракције – црна линија, Молијеров потенцијал интеракције – плава линија и дугин потенцијал интеракције – црвена линија, за протоне енергије 2 MeV каналисане кроз кристал злата Au^{79} оријентације (001).

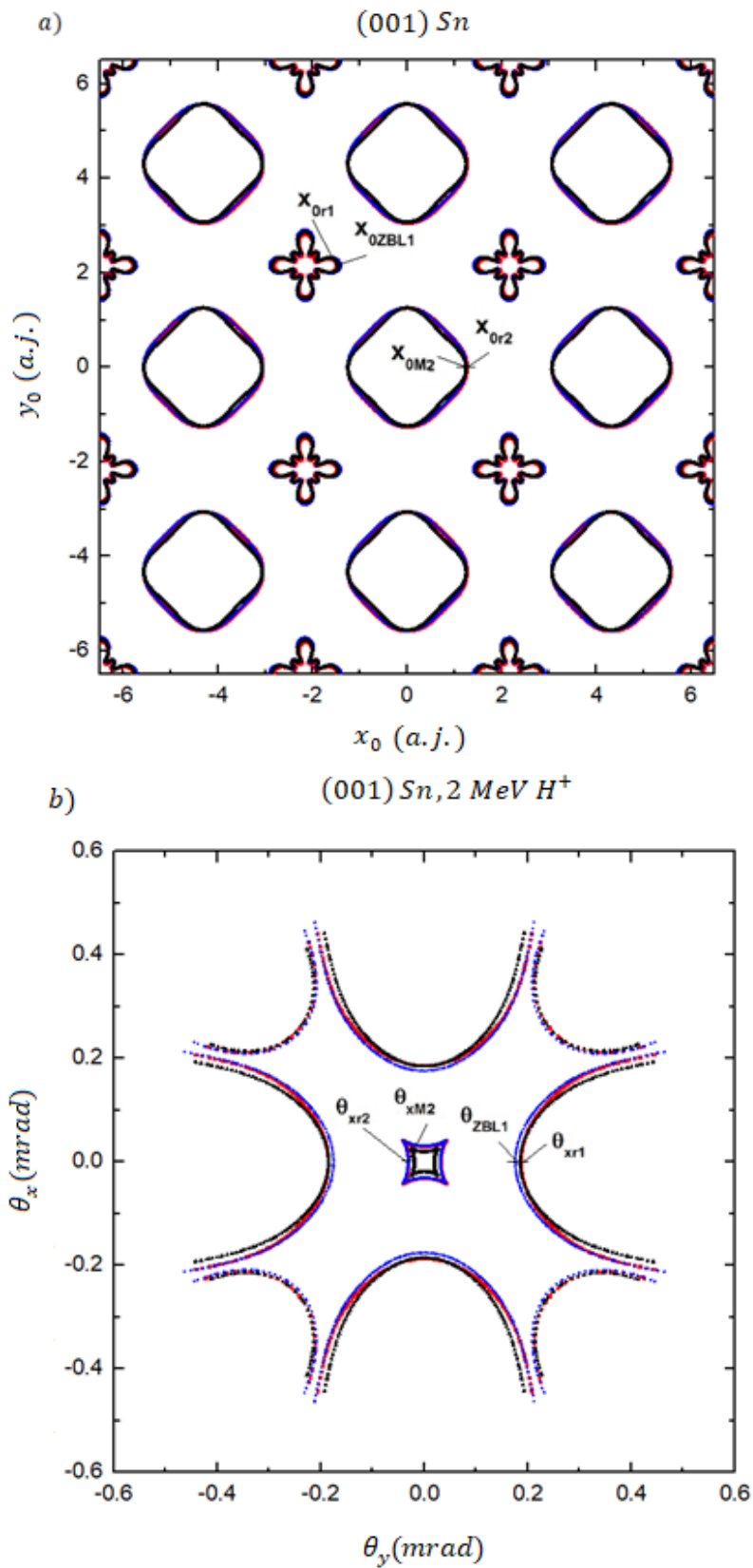
На сликама 6.12, 6.13 и 6.14 су приказане линије дуге у равни ударног параметра и равни угла расејања за ZBL потенцијал интеракције – црна линија, Молијеров потенцијал интеракције – плава линија и дугин потенцијал интеракције – црвена линија, за протоне енергије 2 MeV каналисане кроз кристале угљеника C^6 , германијума Ge^{32} и калаја Sn^{50} (дијамантска кристалографска структура) оријентације (001) у односу на правац снопа протона. Као и у случају базно и површински центрираних кубних кристала ова три кристала су изабрана због њихове велике разлике у величини квадратног канала и површинској густини наелектрисања. Дебљина кристала угљеника C^6 је 35 nm , кристала германијума Ge^{32} је 39 nm и кристала калаја Sn^{50} 41 nm . Добијена вредност параметра δ_2'' за угљеник C^6 је 1.50, за германијум Ge^{32} 1.823 и за калај Sn^{50} је 1.818.



Слика 6.12. Линије дуге у а) равни ударног параметра и б) равни угла расејања, за ZBL потенцијал интеракције – црна линија, Молијеров потенцијал интеракције – плава линија и дугин потенцијал интеракције – црвена линија, за протоне енергије 2 MeV каналисане кроз дијамантски кристал C^6 оријентације (001).



Слика 6.13. Линије дуге у а) равни ударног параметра и б) равни угла расејања, за ZBL потенцијал интеракције – црна линија, Молијеров потенцијал интеракције – плава линија и дугин потенцијал интеракције – црвена линија, за протоне енергије 2 MeV каналисане кроз кристал германијума Ge^{32} оријентације (001).

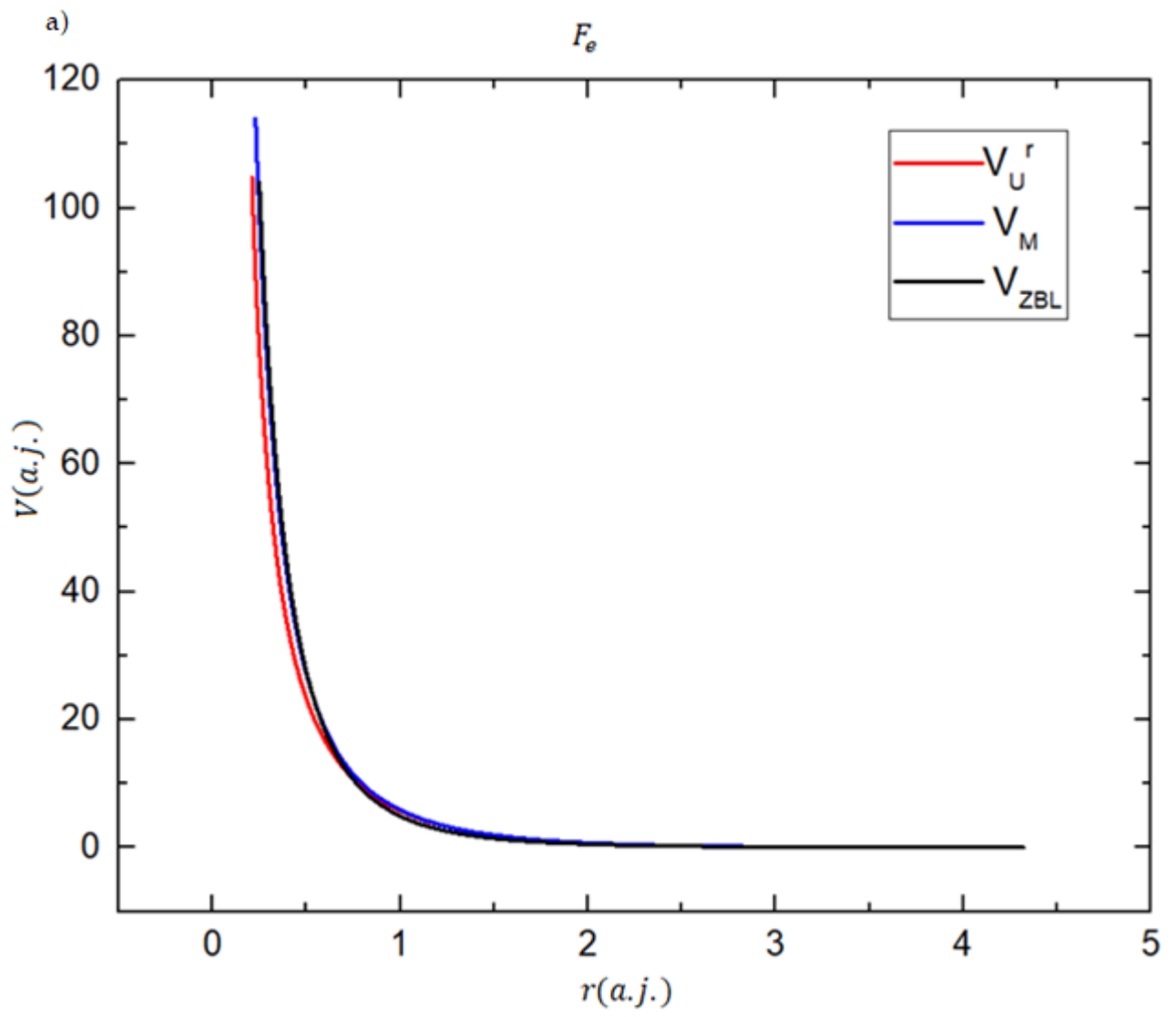


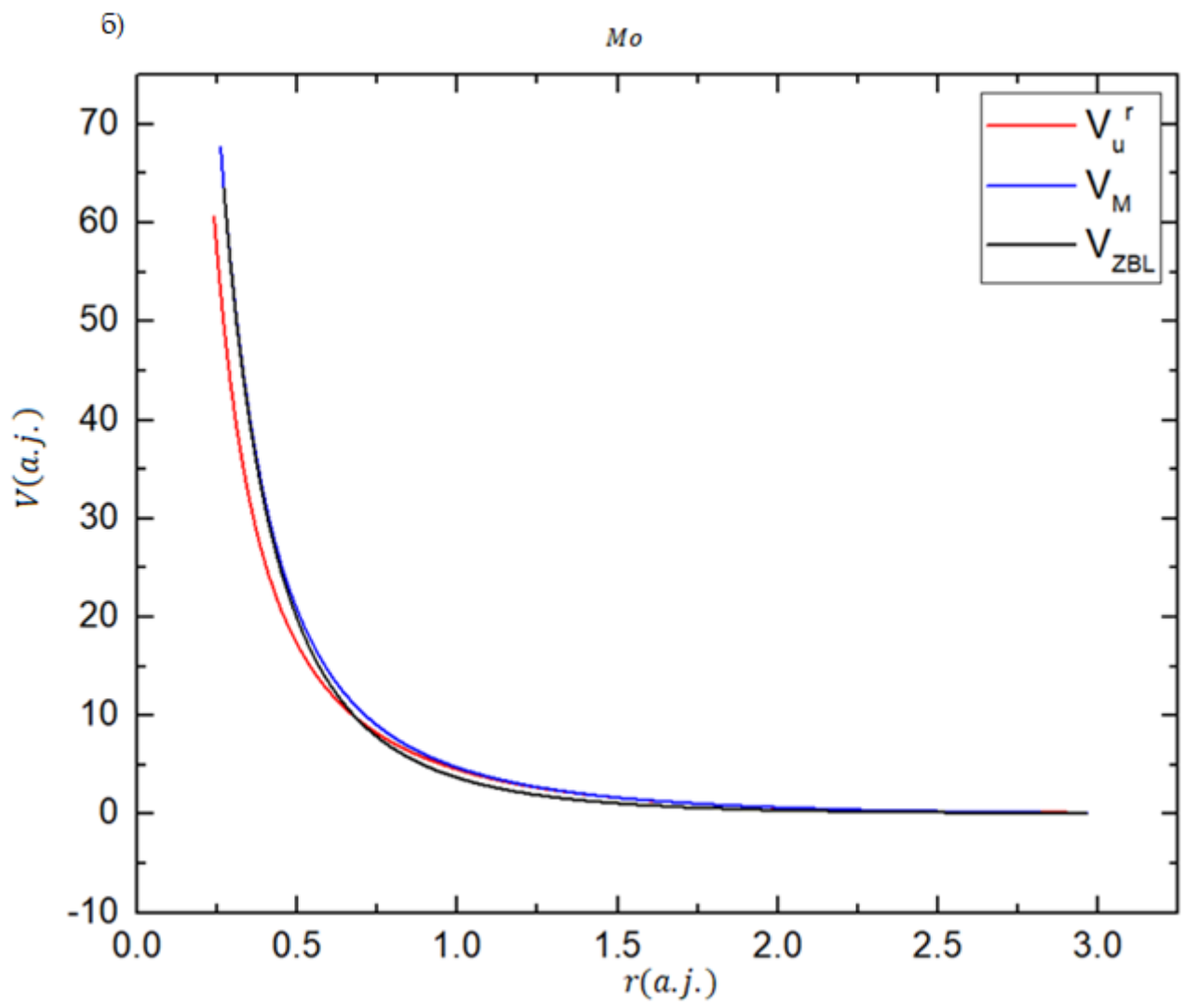
Слика 6.14. Линије дуге у а) равни ударног параметра и б) равни угла расејања, за ZBL потенцијал интеракције – црна линија, Молијеров потенцијал интеракције – плава линија и дугин потенцијал интеракције – црвена линија, за протоне енергије $2 MeV$ каналисане кроз кристал калаја Sn^{50} оријентације (001).

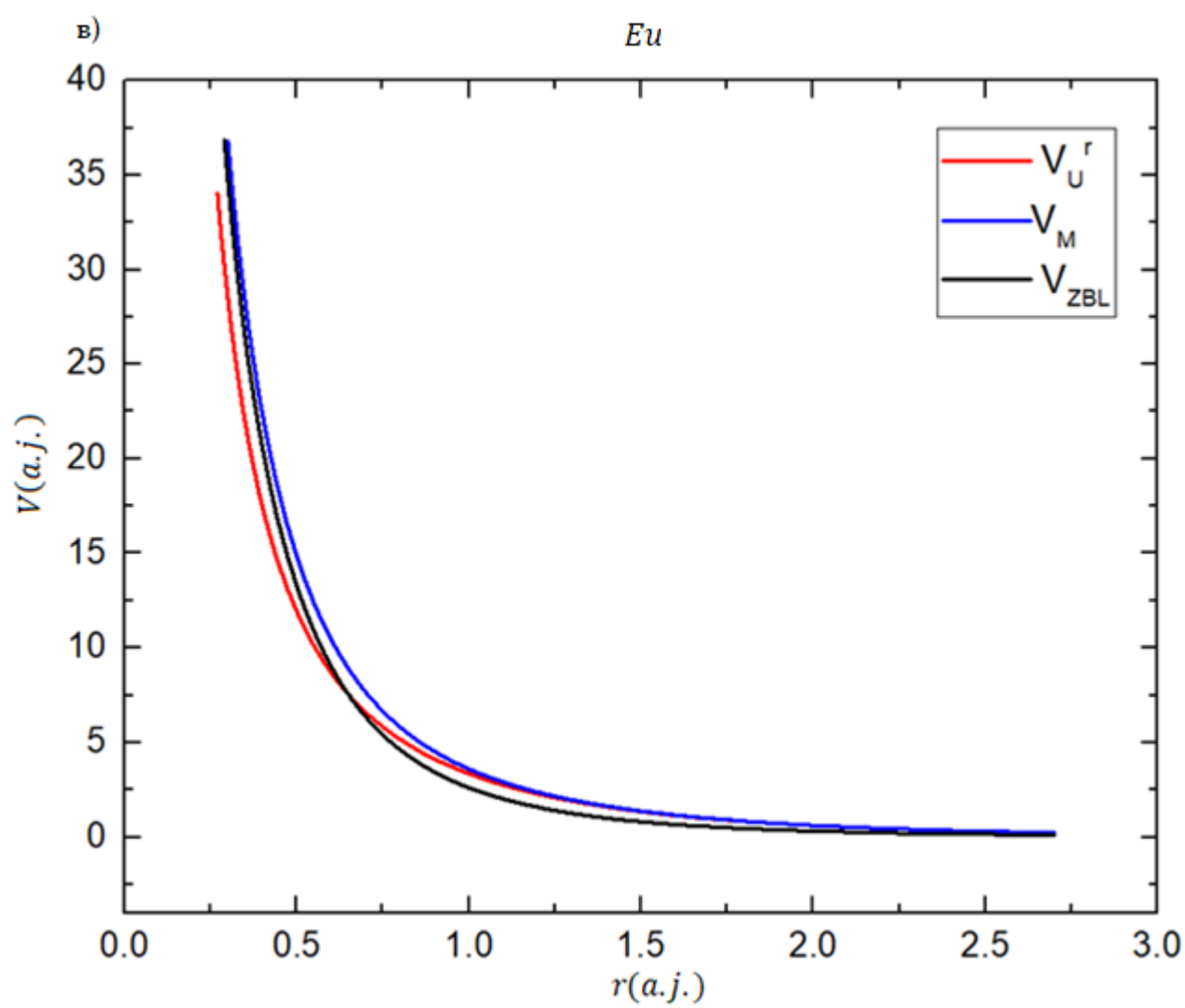
Са слика 6.6 – 6.14 се јасно може приметити да је поклапање спољашње линије дуге, генерисане са дугиним потенцијалом интеракције и спољашње линије дуге добијене са ZBL потенцијалом интеракције и унутрашње линије дуге генерисане са дугиним потенцијалом интеракције са унутрашњом линијом дуге генерисаном са Молијеровим потенцијалом интеракције, у равни угла расејања, за кристале гвожђа Fe^{32} , молибдена Mo^{42} , еуропијума Eu^{63} , алуминијума Al^{13} , калцијума Ca^{20} , злата Au^{79} , германијума Ge^{32} и калаја Sn^{50} одлично, док код кристала угљеника/дијаманта C^6 то није случај. Морфолошком анализом за вредности параметара d_1 и d_2 за кристал гвожђа Fe^{32} су добијене вредности од $0.002\ mrad$ и $0.002\ mrad$, за кристал молибдена Mo^{42} вредности од $0.00001\ mrad$ и $0.0003\ mrad$, за кристал еуропијума Eu^{63} вредности од $0.003\ mrad$ и $0.00002\ mrad$, за кристал алуминијума Al^{13} вредности од $0.001\ mrad$ и $0.00002\ mrad$, за кристал калцијума Ca^{20} вредности од $0.0008\ mrad$ и $0.002\ mrad$, за кристал злата Au^{79} вредности од $0.004\ mrad$ и $0.0002\ mrad$, за кристал германијума Ge^{32} вредности од $0.003\ mrad$ и $0.0002\ mrad$ и за кристал калаја Sn^{50} вредности од $0.00001\ mrad$ и $0.00002\ mrad$, респективно. Поред тога за дијамантски C^6 кристал разлике између одговарајућих линија су јасно изражене и у овом случају вредности за d_1 и d_2 су $0.01\ mrad$ и $0.01\ mrad$, респективно.

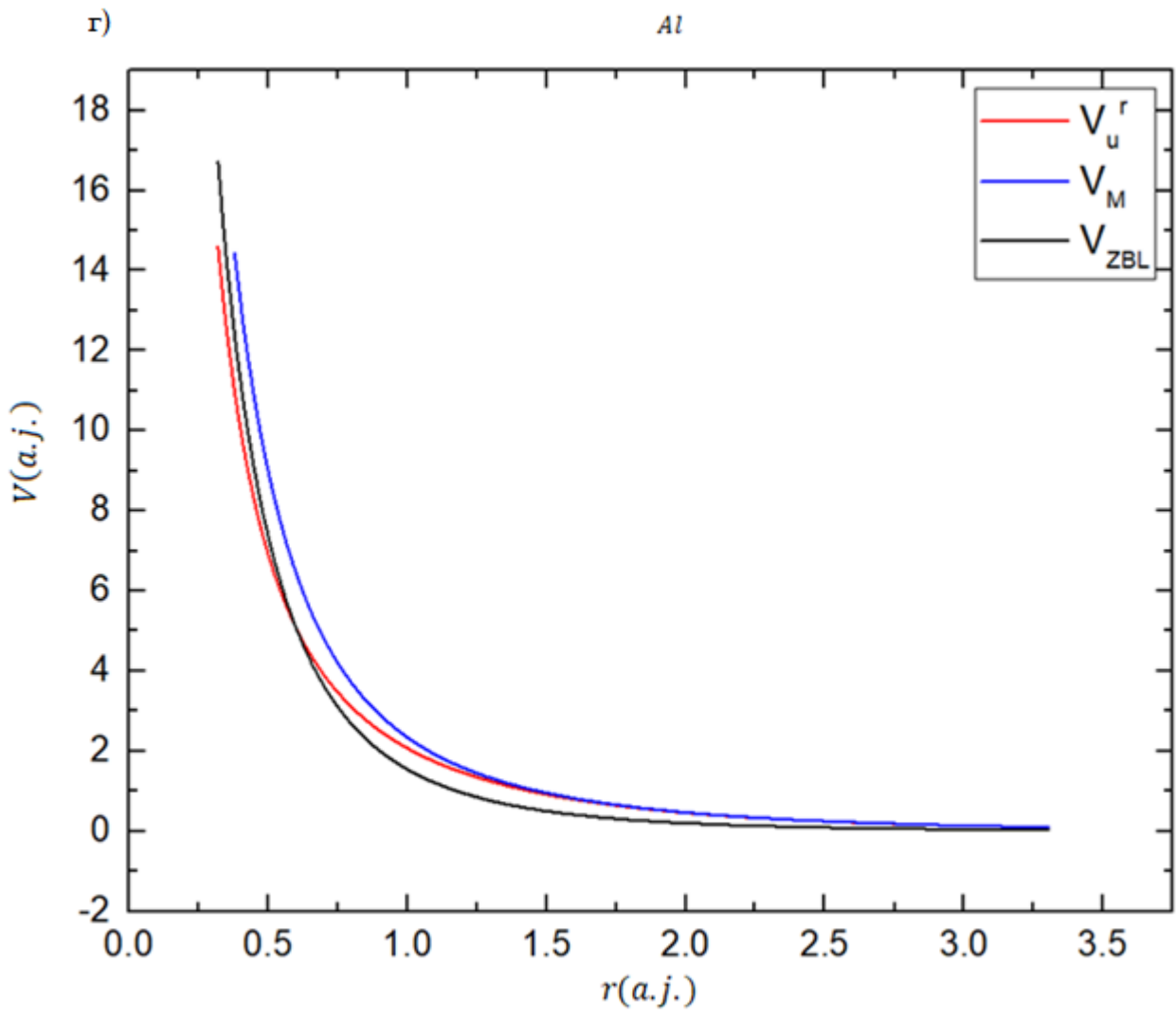
У случају угљеника C^6 , који је изузетак, објашњење се може наћи у чињеници да атом угљеника C^6 има мали атомски број Z_2 , а самим тиме потенцијал интеракције Кулоновог типа са функцијом екранирања Томас - Ферми типа у његовом случају нису задовољавајући. Са друге стране, везе између угљеникових C^6 атома су веома јаке, што резултира малим квадратним каналом (001). Као резултат тога унутрашња и спољашња линија дуге у случају угљеника C^6 се не могу довољно добро одвојити, што се види на слици 6.10 (б). Као последица тога, неки други потенцијал интеракције, добијен другим приступом, као нпр. Дојл - Тарнеров, би био много прикладнији за употребу [9].

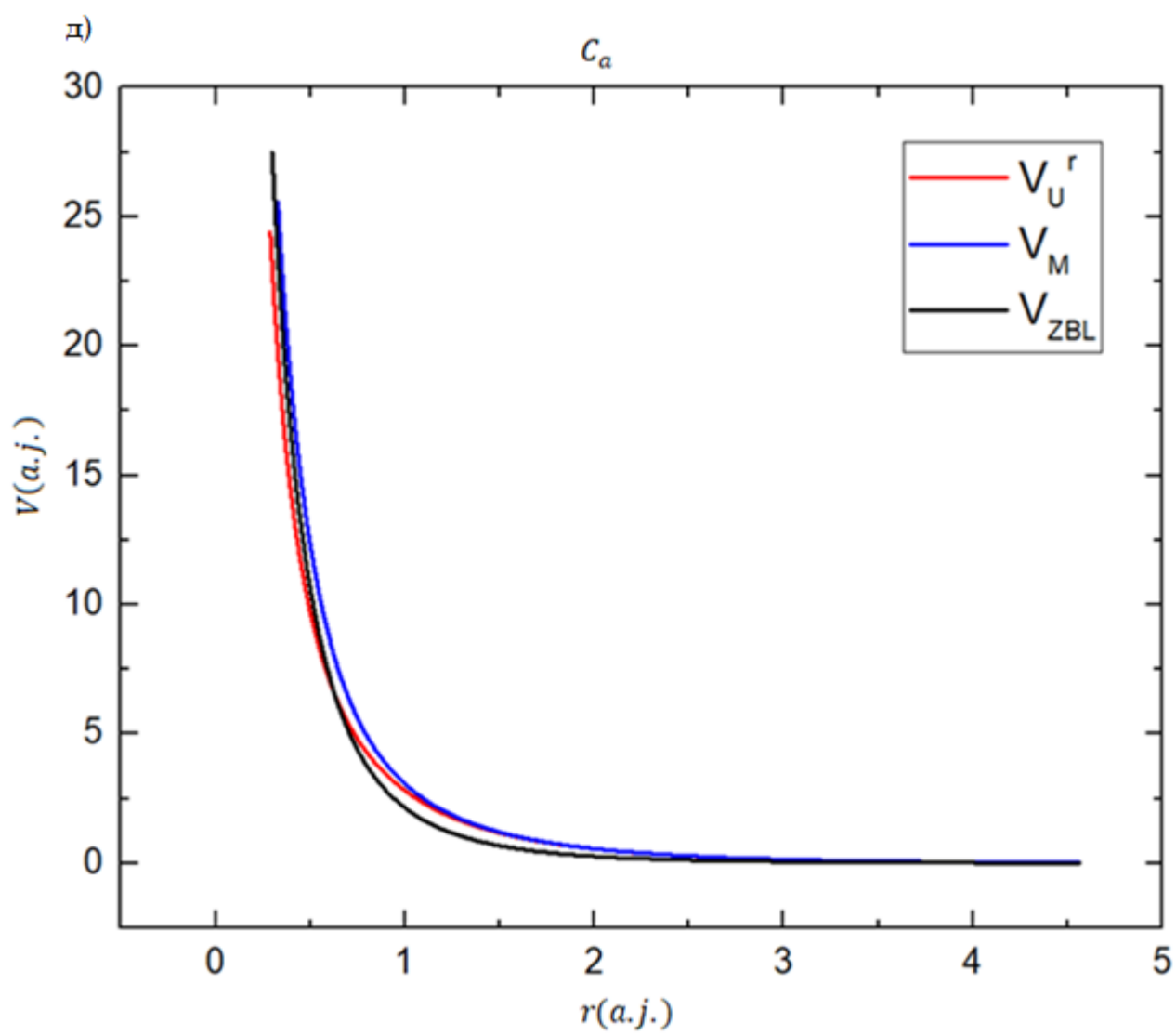
Морфолошко поређење ZBL, Молијеровог и дугиног потенцијала интеракције за случај протон - гвожђе Fe^{32} , протон - молибден Mo^{42} , протон - еуропијум Eu^{63} , протон - алуминијум Al^{13} , протон - калцијум Ca^{20} , протон - злато Au^{79} , протон - угљеник C^6 , протон - германијум Ge^{32} и протон - калај Sn^{50} је показано на слици 6.15 (а), (б), (ц), (д), (е), (ф), (г), (х) и (и), респективно. Закључује се да дугин потенцијал интеракције добро апроксимира ZBL потенцијал интеракције за мале ударне параметре и Молијеров потенцијал интеракције за велике ударне параметре у случају протон - гвожђе Fe^{32} , протон - молибден Mo^{42} , протон - еуропијум Eu^{63} , протон - алуминијум Al^{13} , протон - калцијум Ca^{20} , протон - злато Au^{79} , протон - германијум Ge^{32} и протон - калај Sn^{50} . У случају протон - угљеник C^6 ово очигледно није случај. Како при каналисању, јон доживљава силу која је једнака градијенту потенцијала интеракције, у случају угљеника C^6 не треба очекивати добро слагање између експериментално добијених угаоних расподела и оних генерисаних употребом универзалног дугиног потенцијала [57].

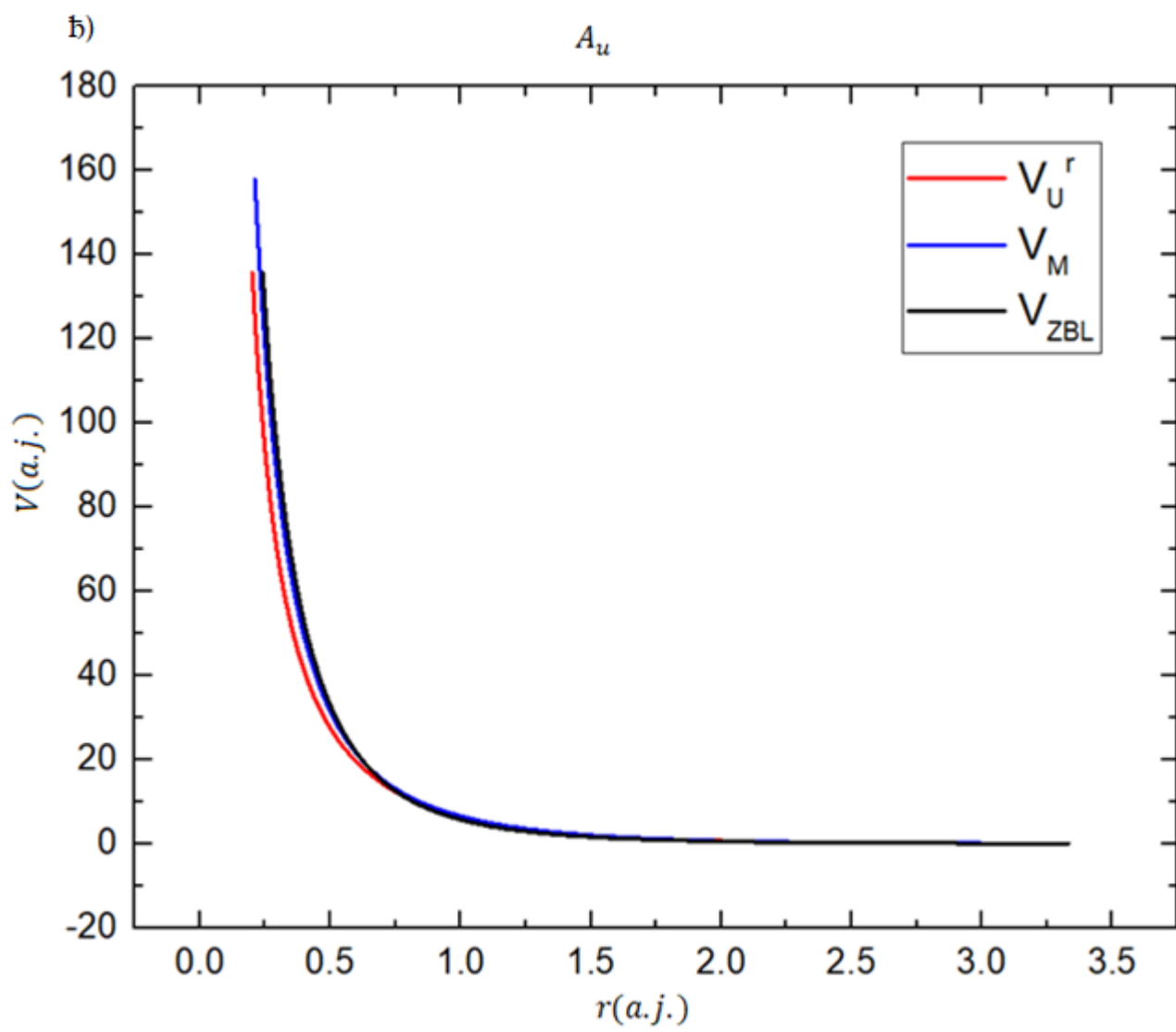


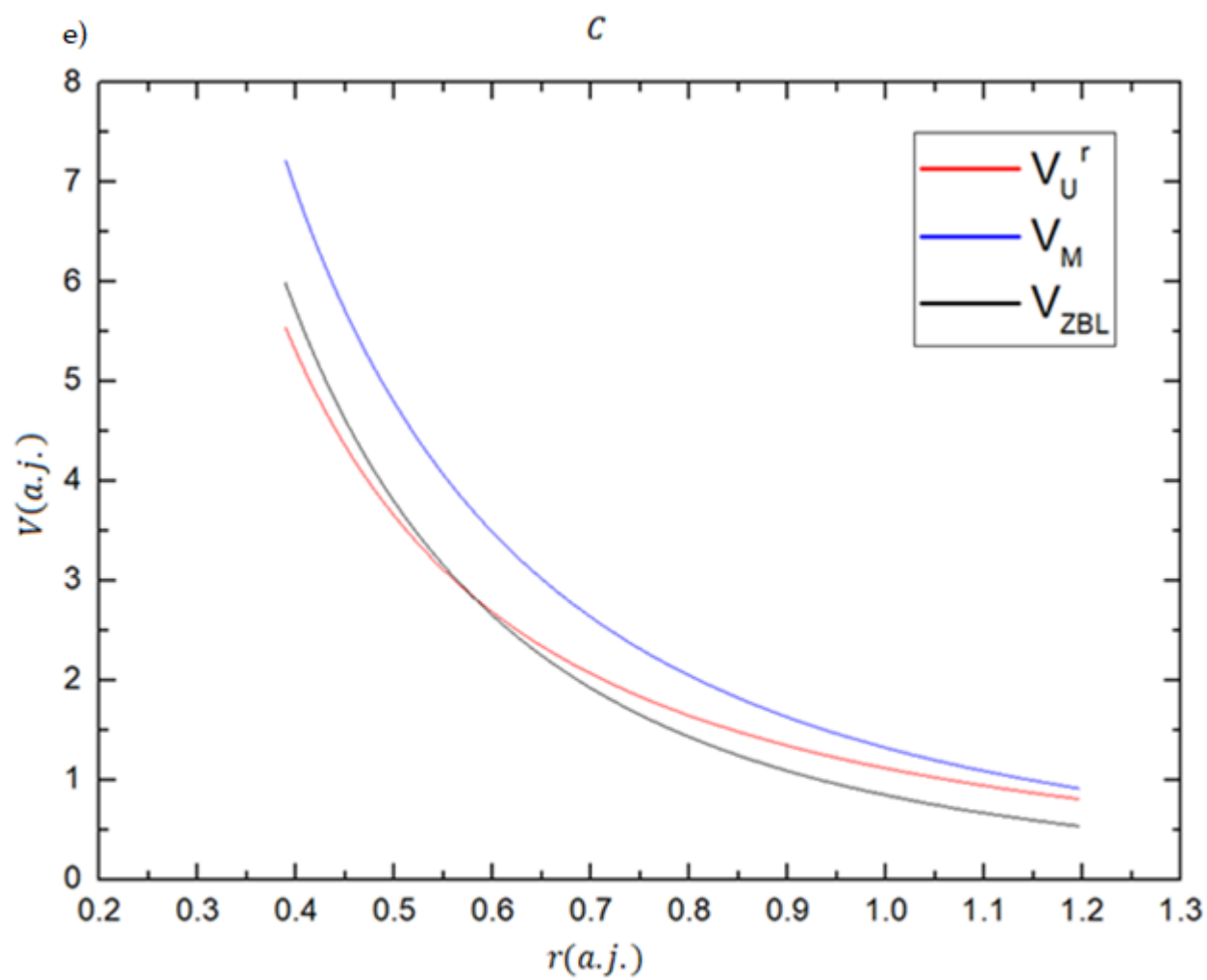


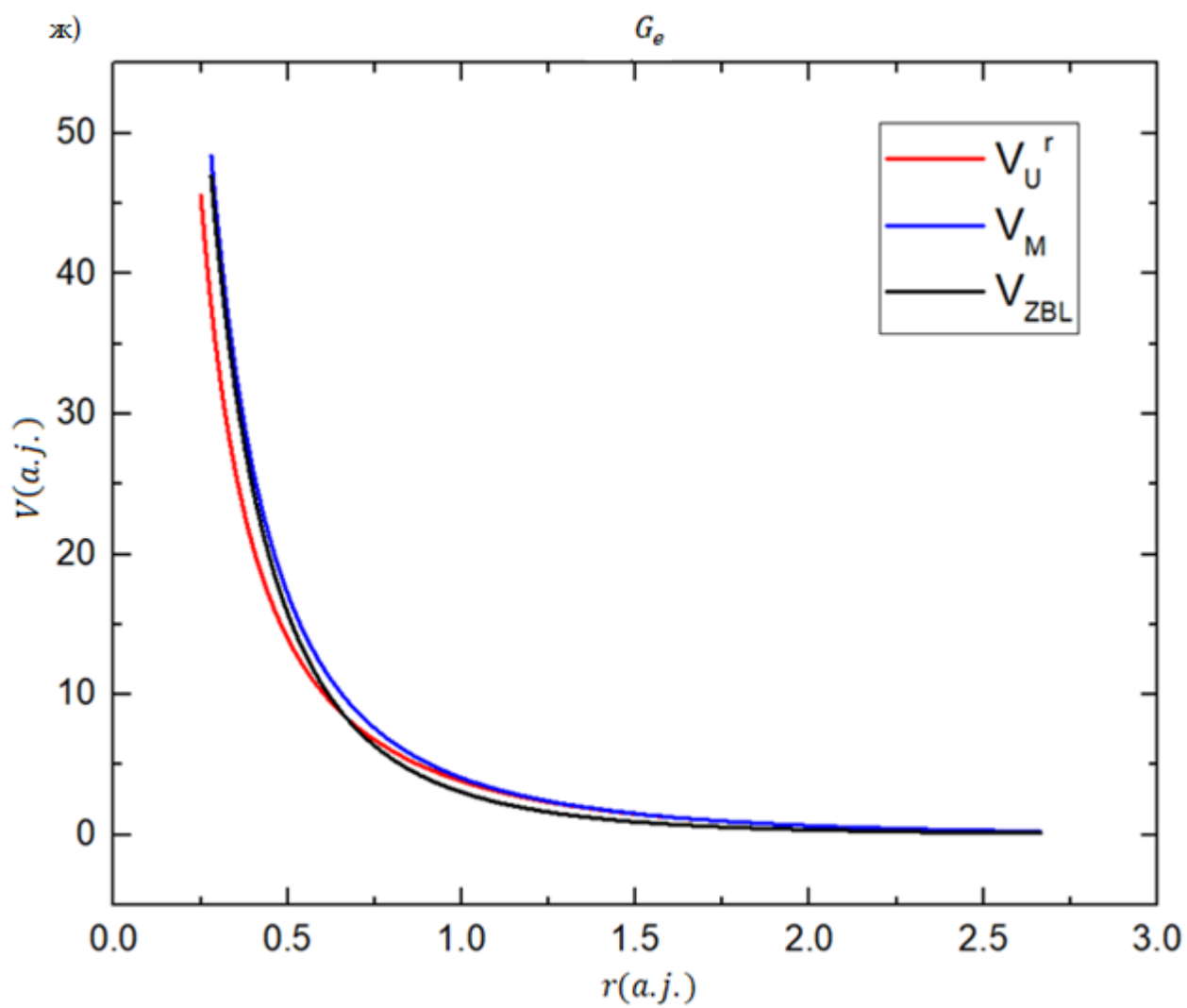


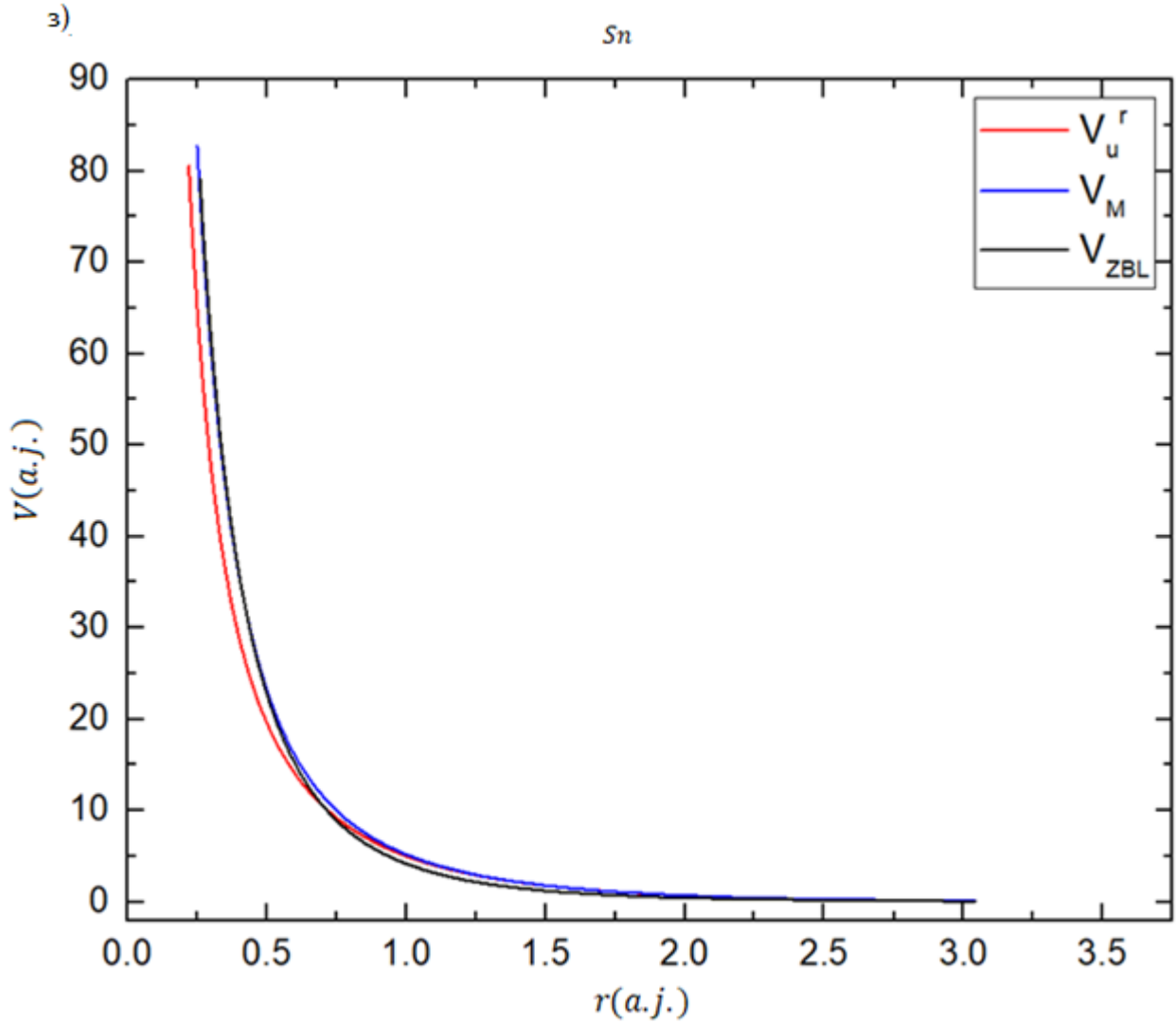












Слика 6.15. ZBL потенцијал интеракције V_{ZBL} - црна линија, Молијеров потенцијал интеракције V_M - плава линија и дугин потенцијал интеракције V_U^r - црвена линија за: а) гвожђе Fe^{32} , б) молибден Mo^{42} , в) еуропијум Eu^{63} , г) алуминијум Al^{13} , д) калцијум Ca^{20} , ђ) злато Au^{79} , е) угљеник/дијамант C^6 , ж) германијум Ge^{32} и з) калај Sn^{50} , у зависности од атомског растојања r .

На овај начин је успешно добијен универзални дугин потенцијал интеракције у случају каналисања протон - кристал, који је облика:

$$V_U^r = (Z_1 Z_2 e^2 / R) \sum_{i=1}^3 \gamma_i e^{-(\delta_i' r / a_F)} \quad 6.2$$

где су γ_i и $\delta_i'^r$ параметри фитовања са вредностима (0.10, 0.55, 0.35) и (5.124, 1.85, 0.2562), респективно. Релативна стандардна девијација за параметар фитовања $\delta_i'^r$ је 6%.

За даље истраживање и проверу/побољшање дугиног универзалног потенција интеракције неопходно је да се реализују експерименти високе резолуције трансмисије протона кроз веома танке кристале у (001) оријентацији.

7. УНИВЕРЗАЛНИ ДУГИН ПОТЕНЦИЈАЛ ИНТЕРАКЦИЈЕ У СЛУЧАЈУ ТРОУГАОНИХ КАНАЛА КУБНИХ КРИСТАЛА

Након конструисања горе поменутог потенцијала интеракције, даљи рад се базирао на покушају конструисања универзалног дугиног потенцијала интеракције за случај каналисања протон - кристал у оријентацији кристала (111) у односу на сноп упадних протона, односно на случајеве каналисања протона кроз троугаоне канале кубних кристала. Поред тога уведена су одређена побољшања методологије рада. Ова побољшања су примењена и на квадратне канале (оријентација (001)) и као резултат тога, за ова два аксијална правца користећи исте физичке аргументе, било је могуће добити конзистентне вредности параметара фитовања за јон - атом потенцијал интеракције [56].

Као што је већ напоменуто у претходном поглављу ради једноставности, у првој апроксимацији, за све случајеве протон - кристал, Фирсов радијус екранирања је узет са константним вредностима параметара фитовања као за случај протон - силицијум Si^{14} . И поред ове физички погрешне апроксимације било је могуће добити универзални протон - кристал потенцијал интеракције. На основу ове чињенице, Фирсов радијус екранирања са узимањем у обзир зависности од атомског броја кристала Z_2 је у потпуности примењен. Поред тога, прецизно је дефинисано значење „блиских“ и „далеких“ ударних параметара за различите атомске бројеве кристала у различитим каналима кристала. Трећа поправка методологије је била везана за подударање линија дуга. Како је циљ да се одговарајуће линије дуга глобално покlope, са физичке стране гледишта, веродостојно је да се не инсистира на савршеном подударању између две карактеристичне тачке на линијама дуге, већ да се покуша да се установи одређени квантитативни критеријум за одговарајуће линије дуге, тако да се могу сматрати да су глобално довољно блиске. У складу са овим уведен је појам релативног растојања између карактеристичних тачака на одговарајућим линијама дуга. Овакав критеријум ће у исто време довести до тога да ће се линије дуге блиске атомским нивовима и линије дуга далеко од атомских нивоа третирати подједнако. Узимајући у обзир горе наведена побољшања у поступку рада, успели смо не само да поправимо дугин универзални потенцијал интеракције за случај протона и кристала са кубном кристалографском структуром оријентације (001), већ и да проширимо ову методологију за случај каналисања протона кроз кристале са кубном кристалографском структуром оријентације (111).

Као што ће бити показано у наставку текста ове дисертације увођењем поправљене процедуре фитовања могуће је конструисати дугин потенцијал интеракције на сличан начин као и у претходним поглављима [42, 56]. Поред тога показано је, осим за случај угљеника C^6 , да параметар фитовања δ_2^{rr} има исту вредност 1.828 за све кристале са кубном кристалографском структуром оријентације (001) и исту вредност 1.475 за све кристале са кубном кристалографском структуром оријентације (111)!

Процедура фитовања за одређивање оптималне вредности параметра фитовања δ_2^{rr} се састоји од налажења минималне вредности за суму релативних растојања (у процентима) између карактеристичних тачака за одговарајуће спољашње и унутрашње линије дуга. За кубне кристале оријентације (001) овај параметар је:

$$R_{100} = (1/2) \left(\sqrt{((\theta_{xr1} - \theta_{xZBL1})/\theta_{xr1})^2} + \sqrt{((\theta_{xr2} - \theta_{xM2})/\theta_{xr2})^2} \right) \times 100\% \quad 7.1$$

где су θ_{xr1} и θ_{xr2} пресеци линија дуге у равни угла расејања са линијом $\theta_y = 0$ за све кубне кристале оријентисане дуж правца (001), који одговарају дугином потенцијалу за каналисање, за спољашњу и унутрашњу линију дуге, респективно, док су θ_{xZBL1} и θ_{xM2} пресеци линија дуга у равни угла расејања са линијом $\theta_y = 0$, који одговарају ZBL и Молијеровом потенцијалу интеракције за спољашњу и унутрашњу линију дуге, респективно. За кубне кристале оријентације (111) овај параметар је:

$$R_{111} = (1/2)(\sqrt{((\theta_{xr1} - \theta_{xZBL1})/\theta_{xr1})^2} + \sqrt{((\theta_{xr2} - \theta_{xM2})/\theta_{xr2})^2}) \times 100\% \quad 7.2$$

где су θ_{xr1} и θ_{xr2} пресеци линија дуга у равни угла расејања са линијама $\theta_y = 0$ и $\theta_x = 0$, респективно, који одговарају дугином потенцијалу интеракције за каналисање за спољашњу и унутрашњу линију дуге, респективно, док су θ_{xZBL1} и θ_{xM2} пресеци линија дуге у равни угла расејања са линијама $\theta_y = 0$ и $\theta_x = 0$, респективно, који одговарају ZBL и Молијеровом потенцијалу интеракције. Ово значи да је циљ да се спољашња линија дуге генерисана са дугиним потенцијалом интеракције релативно поклопи са одговарајућом спољашњом линијом дуге генерисаном са ZBL потенцијалом интеракције, а да се у исто време, унутрашња линија дуге генерисана са дугиним потенцијалом релативно поклопи са одговарајућом унутрашњом линијом дуге генерисаном са Молијеровим потенцијалом интеракције.

Проблем блиских и далеких јон - атом растојања може да се реши на физички прихватљив начин ако се изрази у јединицама радијуса екранирања (JPE). На основу тога за случај интеракције протона и кристала оријентације (001), тј. одговарајућих квадратних канала дошло се до закључка да се за блиска растојања, за све разматране кристале, вредност може поставити на 1.12 JPE, док се за далека растојања ова вредност може поставити на 2.45 JPE. Добра особина за коришћење JPE је у томе што радијус екранирања зависи од атомског броја атома кристала Z_2 , ($a_F = (9\pi^3/128)^{1/3}(Z_1^{1/2} + Z_2^{1/2})^{-2/3}a_0$), дакле (индиректно) зависи од величине квадратног канала свих разматраних кубних кристалографских кристала и њиховог атомског броја.

Истом анализом се дошло и до података о блиским и далеким јон - атом растојањима за случај (111) протон - кристал оријентација. Услед другачије геометрије једнакостраничних троугаоних канала ова чињеница утиче на другачију еволуцију унутрашње и спољашње линије дуге. Анализа је показала да је потребно поставити блиска растојања на 1.2 JPU и далека растојања на 3.44 JPE, за све кубне кристалографске кристале оријентације (111) у односу на сноп протона.

При оваквим условима далеких и блиских растојања одређене су следеће дебљине кристала: *Cr, Fe, Nb, Mo, Ba, Eu, Ta, W, Al, Ca, Ni, Cu, Sr, Rh, Pd, Ag, Ce, Yb, Ir, Pt, Au, Pb, Th, C, Si, Ge* и *Sn*: 35, 33, 32, 31, 29, 51, 42, 27, 25, 52, 54, 33, 34, 50, 29, 30, 32, 38, 41, 26, 27, 36, 35, 36, 55, 42 и 42 nm респективно, док су за (111) оријентацију дебљине кристала: 31, 28, 26, 29, 27, 59, 49, 24, 33, 37, 52, 21, 21, 48, 20, 20, 21, 31, 31, 16, 17, 17, 23, 26, 37, 43, 33 и 36 nm, респективно.

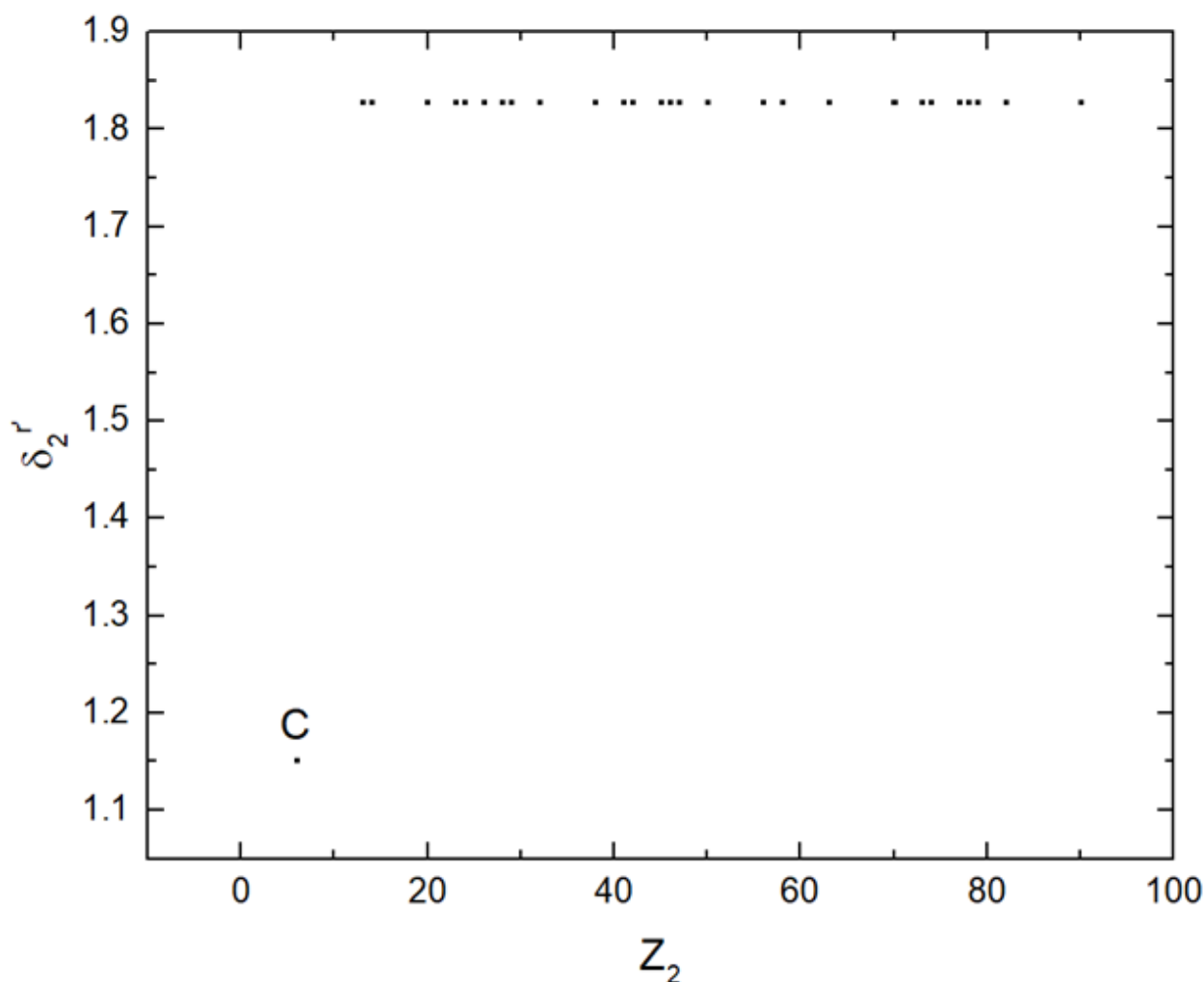
За случај потпуне имплементације Фирсовог радијуса екранирања, тј. његове зависности од атомског броја Z_2 , потребно је увести нове параметре фитовања $\delta_1^{r'}$ и $\delta_3^{r'}$ на следећи начин:

$$\delta_1^{r'} = (a_F/a_{TF})6.0 = \left(Z_2^{1/3} / (Z_1^{1/2} + Z_2^{1/2})^{-2/3} \right) 6.0 \quad 7.3$$

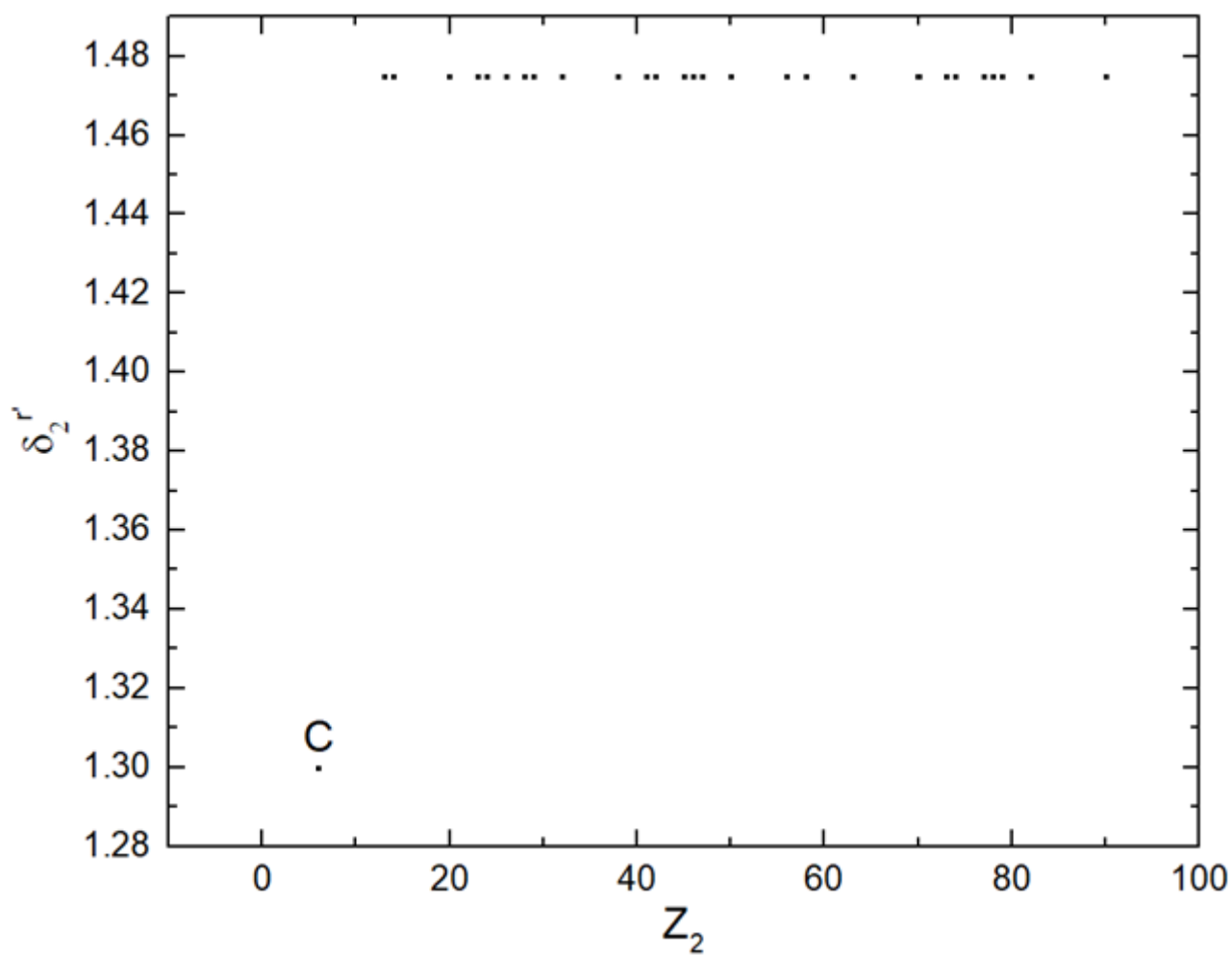
$$\delta_3^{r'} = (a_F/a_{TF})0.3 = \left(Z_2^{1/3} / (Z_1^{1/2} + Z_2^{1/2})^{-2/3} \right) 0.3 \quad 7.4$$

Резултат процедуре фитовања показује да је у случају овако измењене методологије могуће конструисати дугин потенцијал интеракције мењајући само параметар $\delta_2^{r'}$. Пошто добијене вредности за $\delta_2^{r'}$ зависе од параметара R_{100} и R_{111} идеја је да се њихова максимална вредност, ако је то могуће, фиксира тако да се вредности параметра $\delta_2^{r'}$ међусобно што мање разликују за кубне кристале исте оријентације. Анализа је показала да се максимално релативно растојање R_{100} за кубне кристале оријентације (001) може поставити на 4%, осим за случај кристала угљеника/дијаманта C^6 , када износи 9% (слика 7.3). Као резултат тога, параметар $\delta_2^{r'}$ има исту вредност од 1.828 за све разматране кристале, осим за угљеник C^6 , када износи 1.151. Ово је илустровано на слици 7.1.

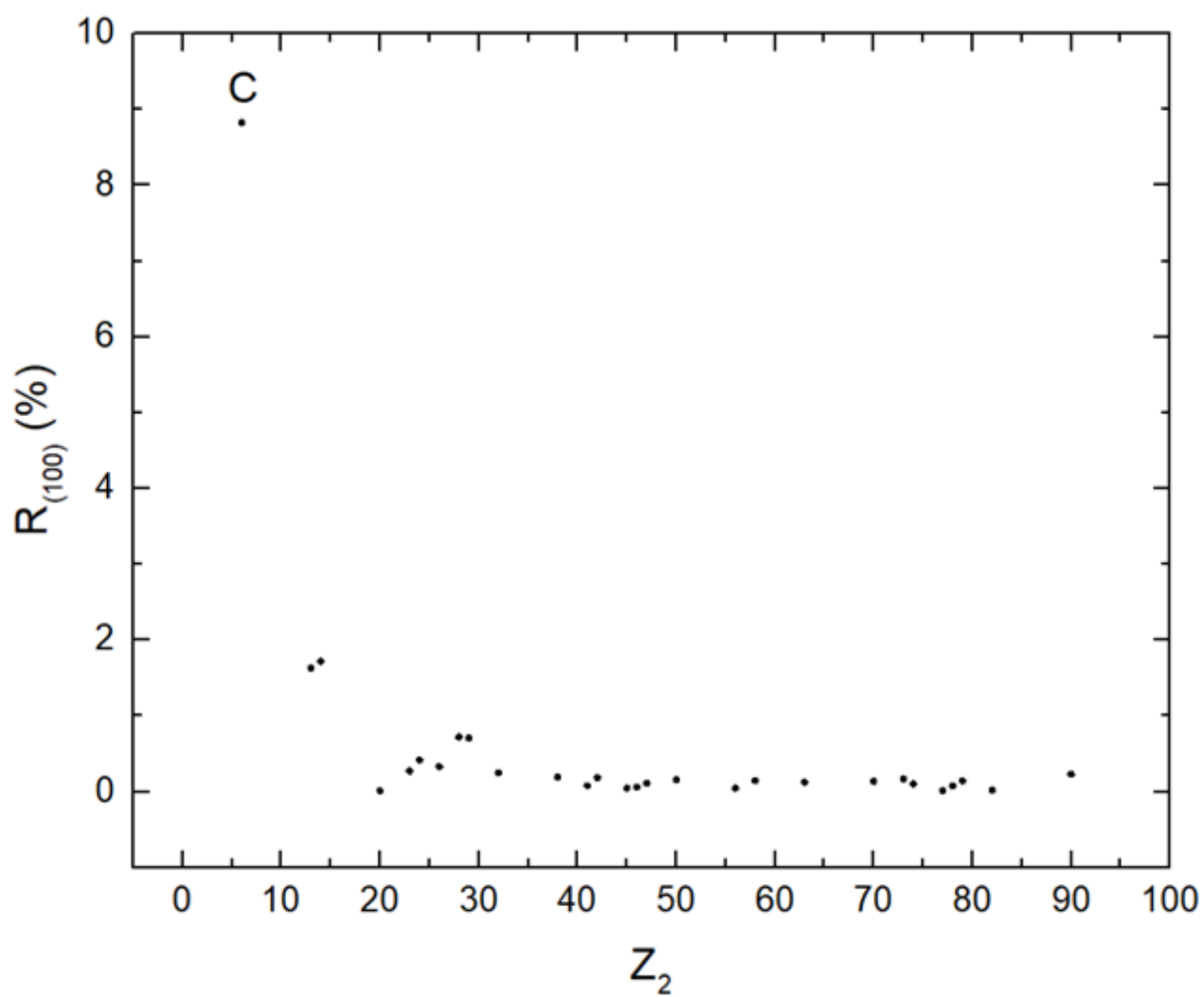
За кубне кристале оријентације (111) потребно је поставити максималну вредност за величину R_{111} на 7%, осим за случај кристала угљеника/дијаманта C^6 , када износи 11% (слика 7.4). Као резултат тога, параметар $\delta_2^{r'}$ има исту вредност од 1.475 за све разматране кристале, осим за угљеник C^6 , када износи 1.30. Ово је илустровано на слици 7.2.



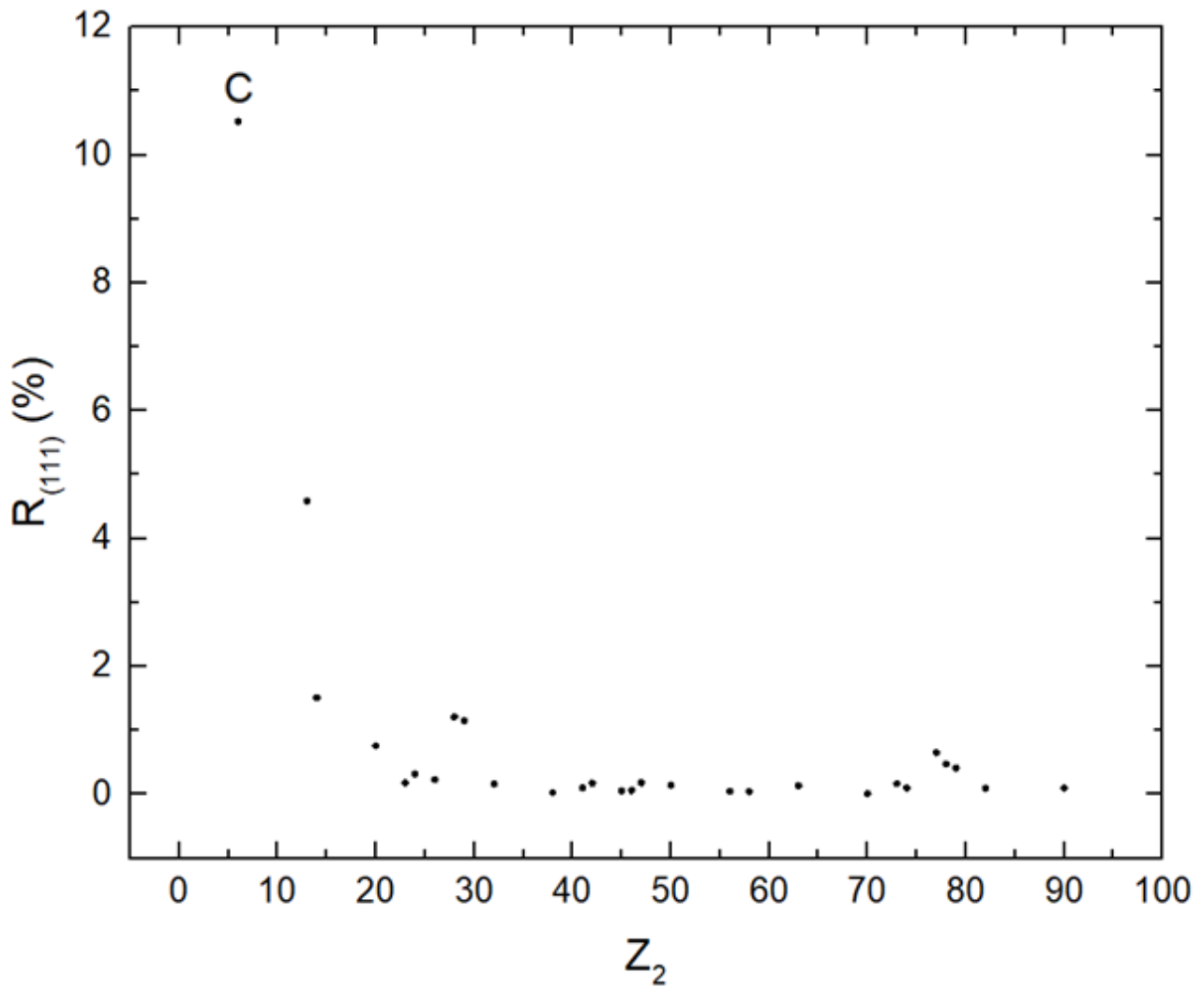
Слика 7.1. Зависност параметра фитовања $\delta_2^{r'}$ у случају квадратних канала кубних кристала од атомског броја кристала Z_2 .



Слика 7.2. Зависност параметра фитовања δ_2^r у случају троуганог канала кубних кристала од атомског броја кристала Z_2 .



Слика 7.3. Вредности квадрата релативних растојања између карактеристичних тачака одговарајућих линија дуге за оријентацију (001) у процентима.



Слика 7.4. Вредности квадрата релативних растојања између карактеристичних тачака одговарајућих линија дуге за оријентацију (111) у процентима.

На овај начин добијени дугини потенцијали интеракције су:

$$V_{100}(R) = (Z_1 Z_2 e^2 / R) \sum_{i=1}^3 \gamma_i e^{-(\delta_i r' R / a_F)} \quad 7.5$$

$$\text{где је } \delta_i r' = \left[\left(Z_2^{1/3} / (Z_1^{1/2} + Z_2^{1/2})^{-2/3} \right) 6.0, 1.828, \left(Z_2^{1/3} / (Z_1^{1/2} + Z_2^{1/2})^{-2/3} \right) 0.3 \right];$$

$$V_{111}(R) = (Z_1 Z_2 e^2 / R) \sum_{i=1}^3 \gamma_i e^{-(\delta_i r' R / a_F)} \quad 7.6$$

$$\text{где је } \delta_i r' = \left[\left(Z_2^{1/3} / (Z_1^{1/2} + Z_2^{1/2})^{-2/3} \right) 6.0, 1.475, \left(Z_2^{1/3} / (Z_1^{1/2} + Z_2^{1/2})^{-2/3} \right) 0.3 \right] [62].$$

Вредности фитинг параметара дугиних потенцијала интеракције у случајевима кубних кристала оријентације (001) и (111) дати су прегледно у табелама 1 и 2, респективно:

Табела 1. Вредности параметара фитовања $\delta_1^{r'}$, $\delta_2^{r'}$ и $\delta_3^{r'}$ дугиног потенцијала интеракције у случају квадратних канала кубних кристала.

Кубни кристали орјентације (001)			
Z_2	$\delta_1^{r'}$	$\delta_2^{r'}$	$\delta_3^{r'}$
6	4.776	1.828	0.239
13	5.097	1.828	0.255
14	5.124	1.828	0.2562
20	5.245	1.828	0.262
23	5.288	1.828	0.264
24	5.301	1.828	0.265
26	5.325	1.828	0.266
28	5.346	1.828	0.267
29	5.356	1.828	0.268
32	5.383	1.828	0.269
38	5.428	1.828	0.271
41	5.447	1.828	0.272
42	5.453	1.828	0.273
45	5.469	1.828	0.273
46	5.474	1.828	0.273
47	5.479	1.828	0.274
50	5.494	1.828	0.275
56	5.519	1.828	0.276
58	5.526	1.828	0.276
63	5.554	1.828	0.277
70	5.565	1.828	0.278
73	5.573	1.828	0.279
74	5.576	1.828	0.279
77	5.583	1.828	0.279
78	5.586	1.828	0.279
79	5.588	1.828	0.279
82	5.595	1.828	0.2798
90	5.612	1.828	0.281

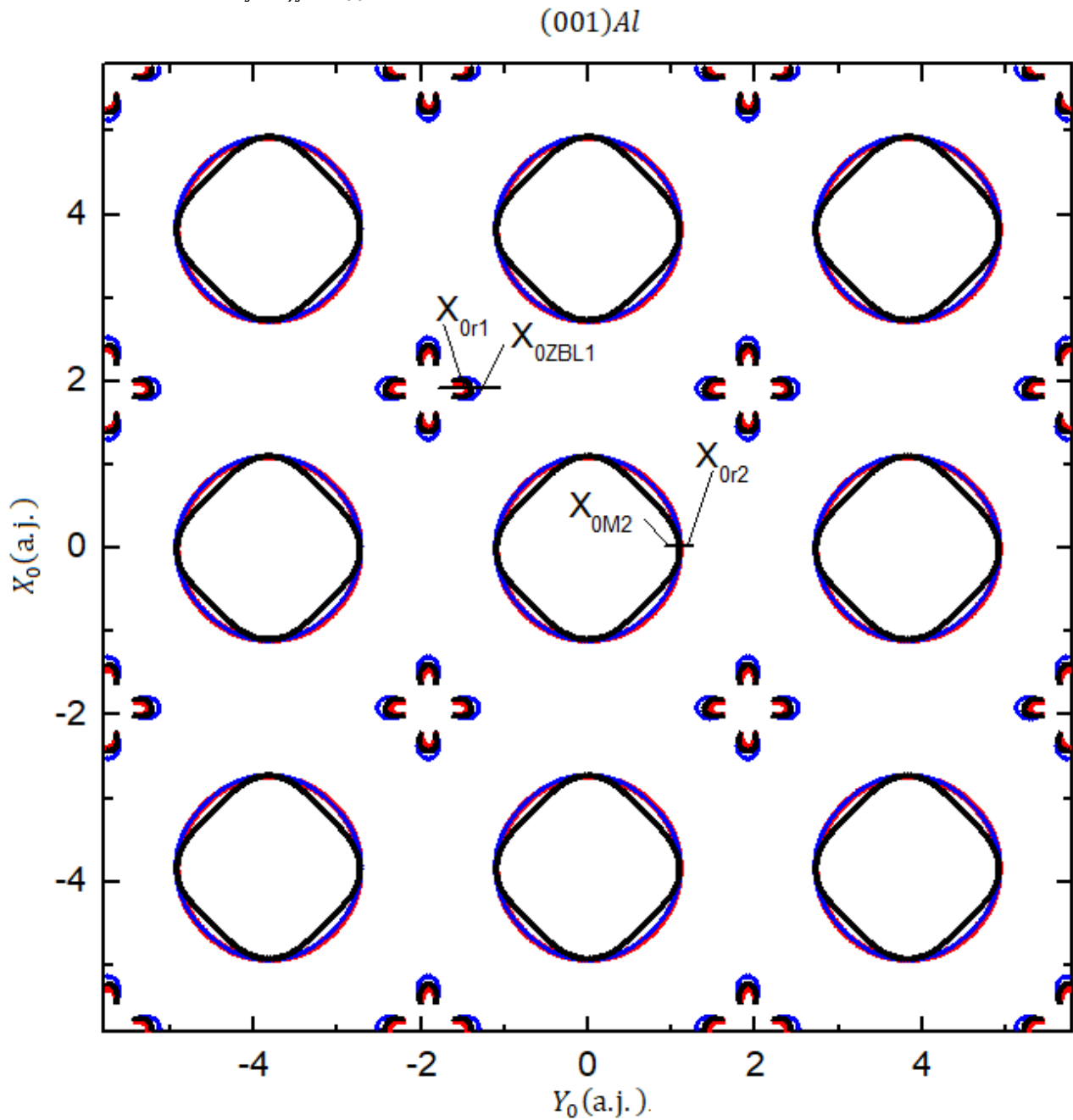
Табела 2. Вредности параметара фитовања $\delta_1^{r'}$, $\delta_2^{r'}$ и $\delta_3^{r'}$ дугиног потенцијала интеракције у случају троуганих канала кубних кристала.

Кубни кристали оријентације (111)			
Z_2	$\delta_1^{r'}$	$\delta_2^{r'}$	$\delta_3^{r'}$
6	4.776	1.475	0.239
13	5.097	1.475	0.255
14	5.124	1.475	0.2562
20	5.245	1.475	0.262
23	5.288	1.475	0.264
24	5.301	1.475	0.265
26	5.325	1.475	0.266
28	5.346	1.475	0.267
29	5.356	1.475	0.268
32	5.383	1.475	0.269
38	5.428	1.475	0.271
41	5.447	1.475	0.272
42	5.453	1.475	0.273
45	5.469	1.475	0.273
46	5.474	1.475	0.273
47	5.479	1.475	0.274
50	5.494	1.475	0.275
56	5.519	1.475	0.276
58	5.526	1.475	0.276
63	5.554	1.475	0.277
70	5.565	1.475	0.278
73	5.573	1.475	0.279
74	5.576	1.475	0.279
77	5.583	1.475	0.279
78	5.586	1.475	0.279
79	5.588	1.475	0.279
82	5.595	1.475	0.2798
90	5.612	1.475	0.281

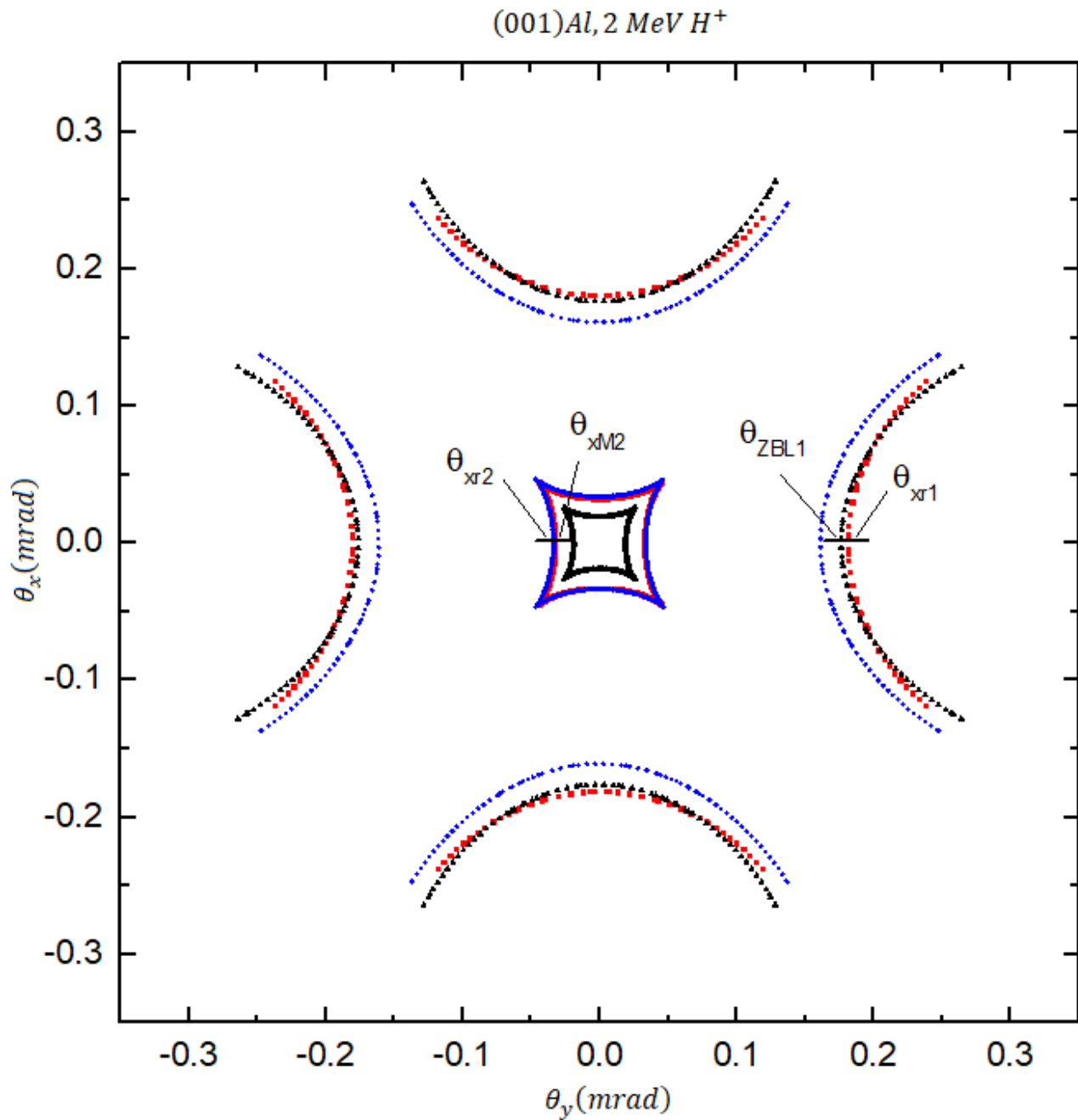
На слици 7.5 су показане линије дуге у равни ударног параметра за случај алуминијума Al^{13} за ZBL потенцијал интеракције - црна линија, Молијеров потенцијал интеракције - плава линија и дугин потенцијал интеракције - црвена линија. Слика 7.6 (а) приказује линије дуге у равни угла расејања за ZBL потенцијал интеракције - црна линија, Молијеров потенцијал интеракције - плава линија и дугин потенцијал интеракције - црвена линија, за кристал алуминијума Al^{13} у оријентацији (001) у односу на сноп упадних протона. Слика 7.6 (б) показује исте линије дуга као и слика 7.6 (а), али само унутрашњи део линија дуге (увеличан поглед). На овим сликама је приказан случај алуминијума Al^{13} , зато што он има највећу вредност за параметар R_{111} (не рачунајући угљеник C^6 , који је једнак 9%).

Јасно је да је подударане између спољашње линије дуге са ZBL потенцијалом интеракције, као и унутрашње линије дуге са Молијеровим потенцијалом

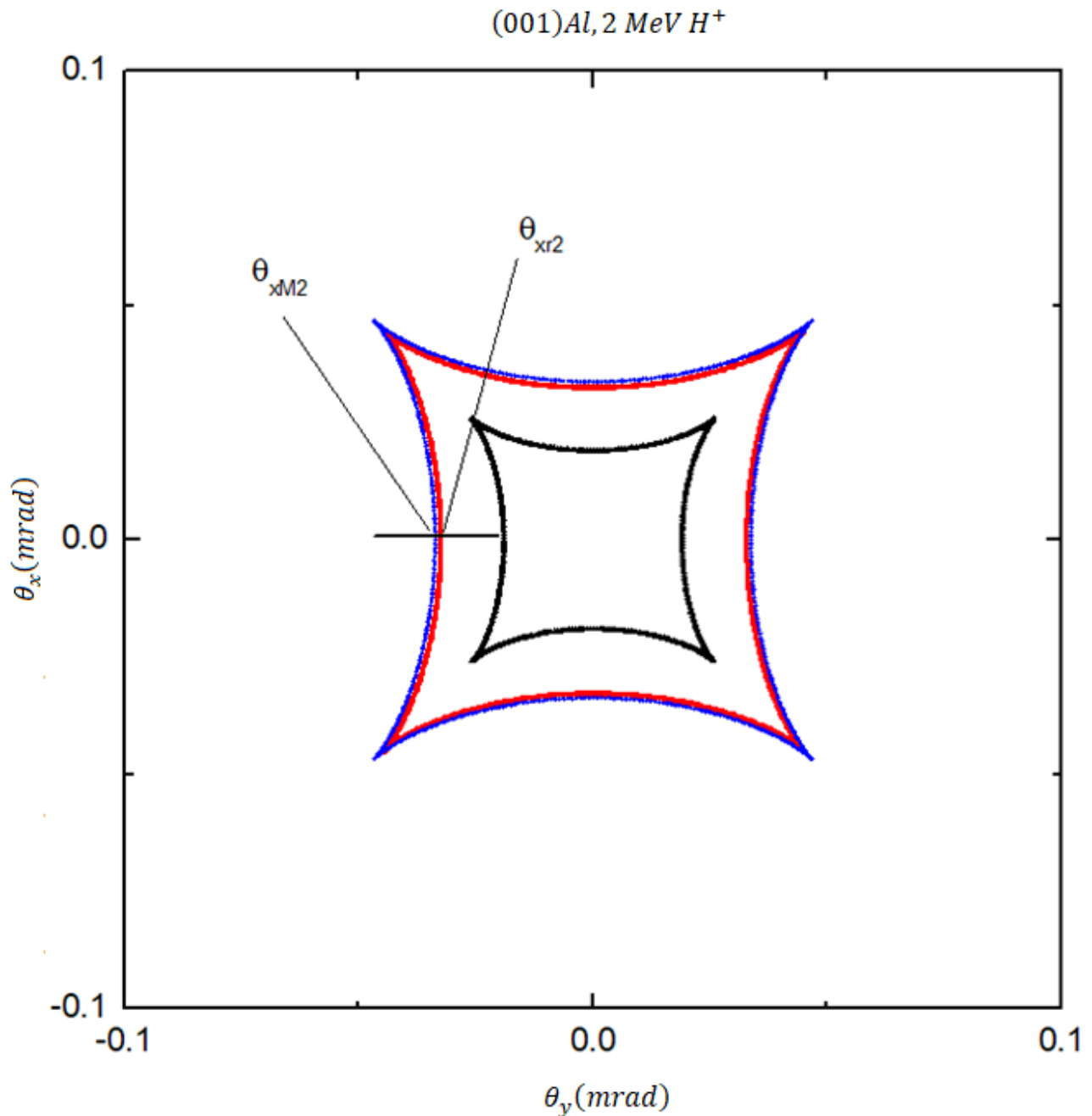
интеракције, са одговарајућим линијама дуге за дугин потенцијал интеракције одлично. У овом случају $R_{100} = 3\%$.



Слика 7.5. Линије дуге у равни ударног параметра за ZBL потенцијал интеракције – црна линија, Молијеров потенцијал интеракције – плава линија и дугин потенцијал интеракције – црвена линија, за кристал алуминијума Al^{13} оријентације (001) у односу на сноп протона енергија $2 MeV$.



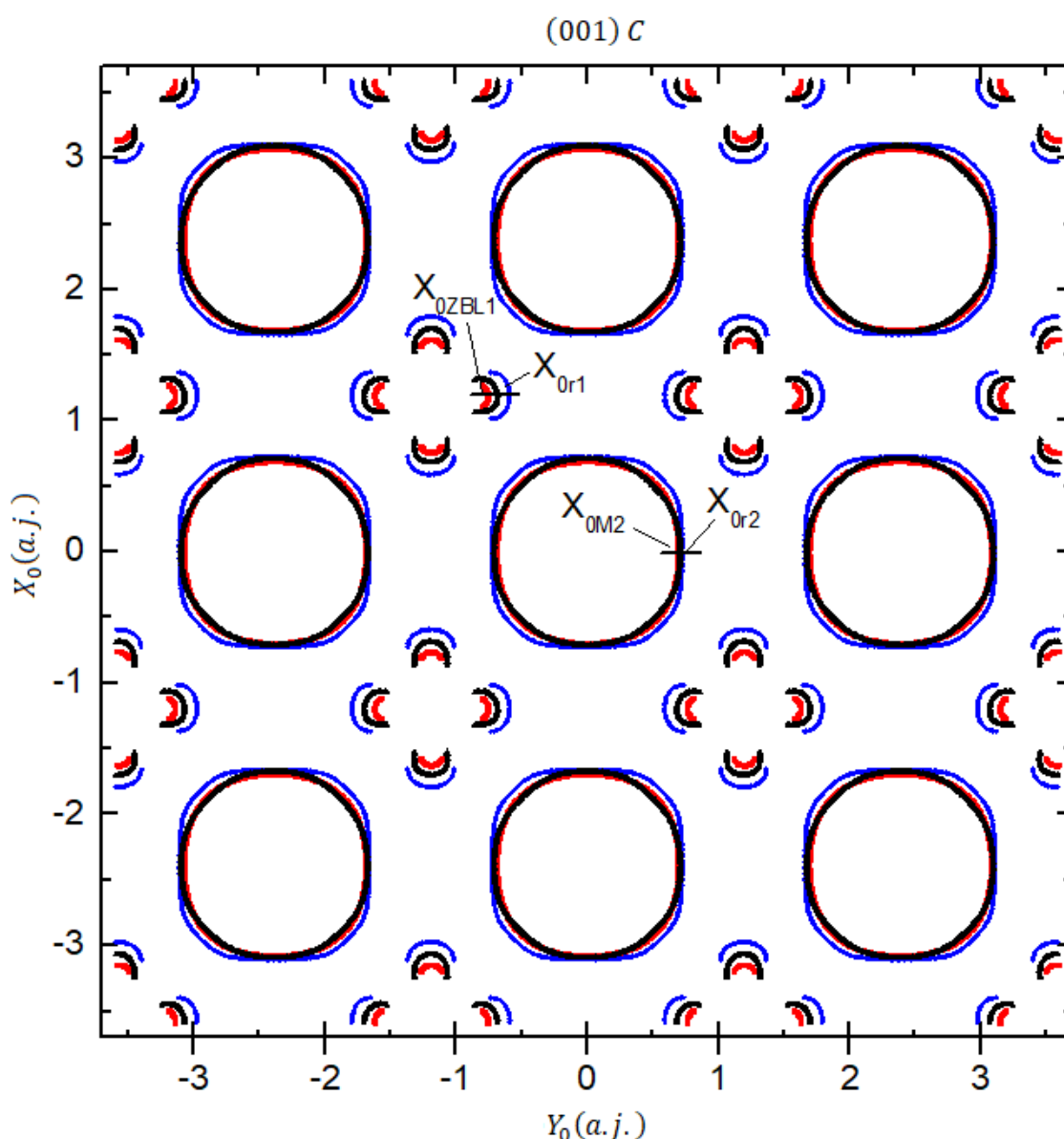
Слика 7.6. а) Линије дуге у равни угла расејања за ZBL потенцијал интеракције – црна линија, Молијеров потенцијал интеракције – плава линија и дугин потенцијал интеракције – црвена линија, за кристал алуминијума Al^{13} оријентације (001) у односу на снап протона енергија 2 MeV.



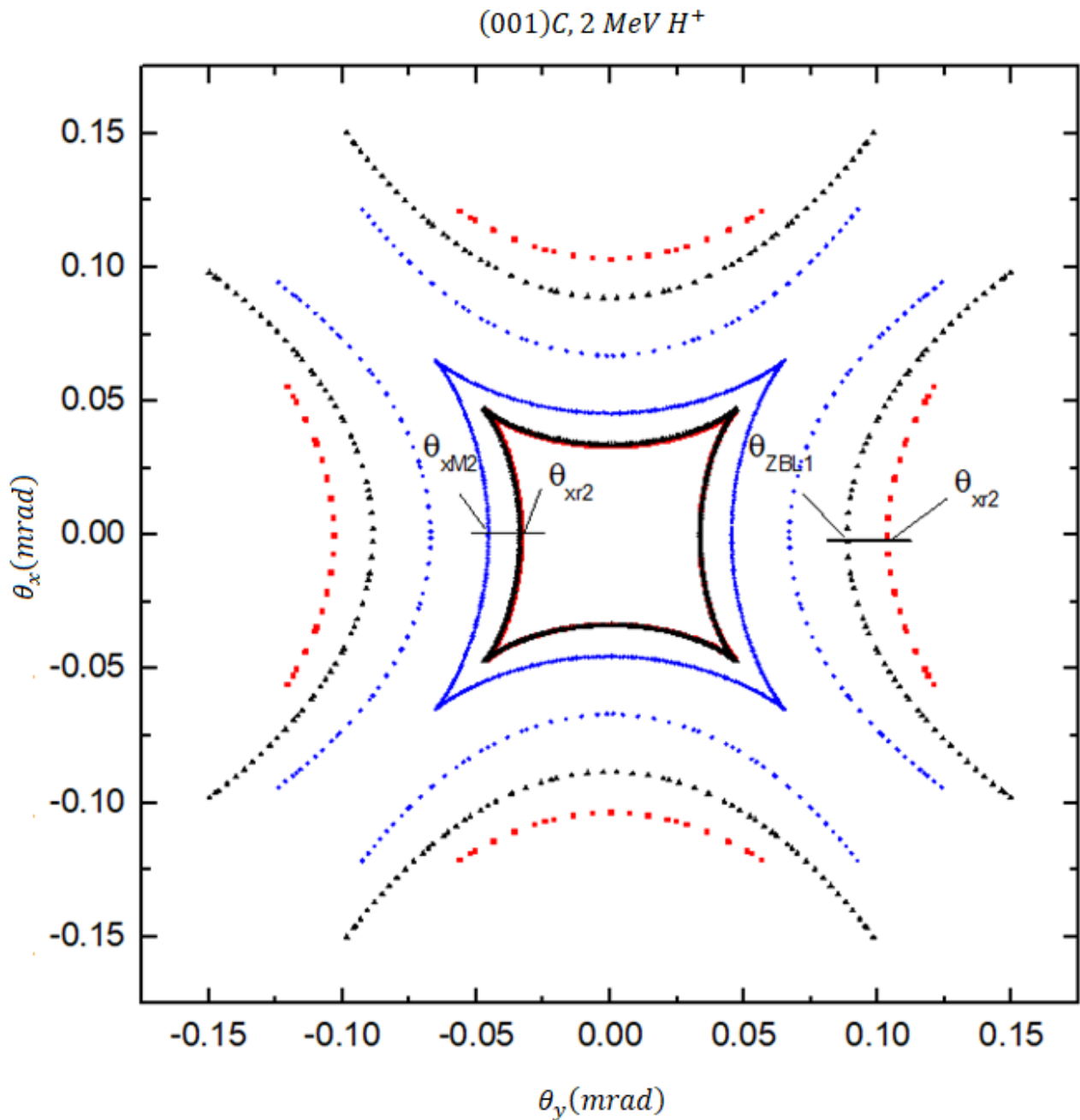
Слика 7.6. б) Увеличане унутрашње линије дуге за исти случај као на слици 7.6. а).

Слике 7.7, 7.8 (а) и 7.8 (б) приказују исто што и слике 7.5, 7.6 (а) и 7.6 (б), респективно, само за случај кристала угљеника/дијамант C^6 оријентације (001). Параметар R_{100} за овај случај има вредност од 9%! Слике 7.8 (а) и 7.8 (б), као и у првом делу рада [56] са апсолутним разликама одговарајућих линија дуга, показују да угљеник C^6 није погодан за овакав метод рада. Поред тога са слике 7.8 (б) се види да мењајући само параметар фитовања δ'_2 није могуће покlopити унутрашњу линију добијену са Молијеровим потенцијалом интеракције са унутрашњом линијом дуге добијеном помоћу дугиног потенцијала интеракције. Насупрот томе, добија се да се унутрашња линија дуге генерисана помоћу дугиног потенцијала интеракције поклапа са унутрашњом линијом дуге генерисаном помоћу ZBL потенцијала интеракције. Додатно као што је приказано на слици 6.4, кристал угљеника/дијамант C^6 има изузетно мали квадратни канал што је последица веома

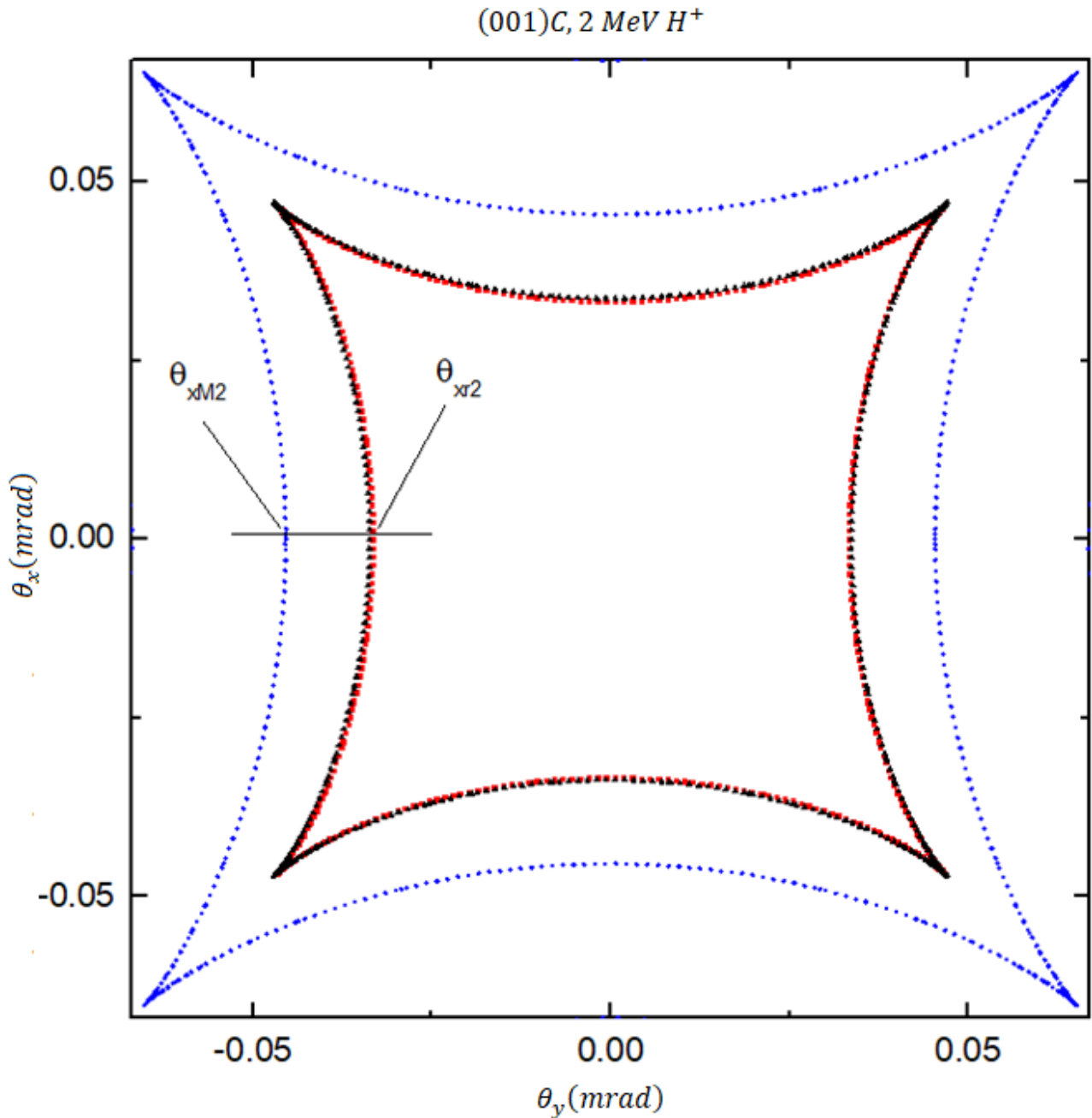
јаким веза између атома угљеника. Поред тога његов атомски број $Z_2 = 6$ је такође веома мали. Ова комбинација малог канала и слабих екранизованих Кулонових сила (одређених малим Z_2) које делују на протон као резултат, поред тога што је кристал угљеника/дијаманта C^6 третиран на исти начин као остали кристали, даје закључак да се ни у овом случају наш морфолошки метод не може применити на случај кристала угљеника/дијаманта C^6 . Поред тога мали број угљеникових електрона доводи у питање прецизност статистичког Томас - Ферми модела атома [57]. Са друге стране Молијеров потенцијал интеракције заснован на Томас - Ферми моделу атома је веома добра апроксимација Томас - Ферми модела која се састоји од суме три функције екранирања [28]. Због тога неки други потенцијал интеракције, нпр. Дојл - Тарнеров потенцијал интеракције [58], чија основа није функција екранирања, је боље примењив на угљеников атом, него Молијеров потенцијал интеракције, што је нарочито показано након открића нових угљеничних наноматеријала [59, 60].



Слика 7.7. Линеје дуге у равни ударног параметра за ZBL потенцијал интеракције – црна линија, Молијеров потенцијал интеракције – плава линија и дугин потенцијал интеракције – црвена линија, за кристал угљеника/дијаманта C^6 оријентације (001) у односу на снап протона енергија 2 MeV.

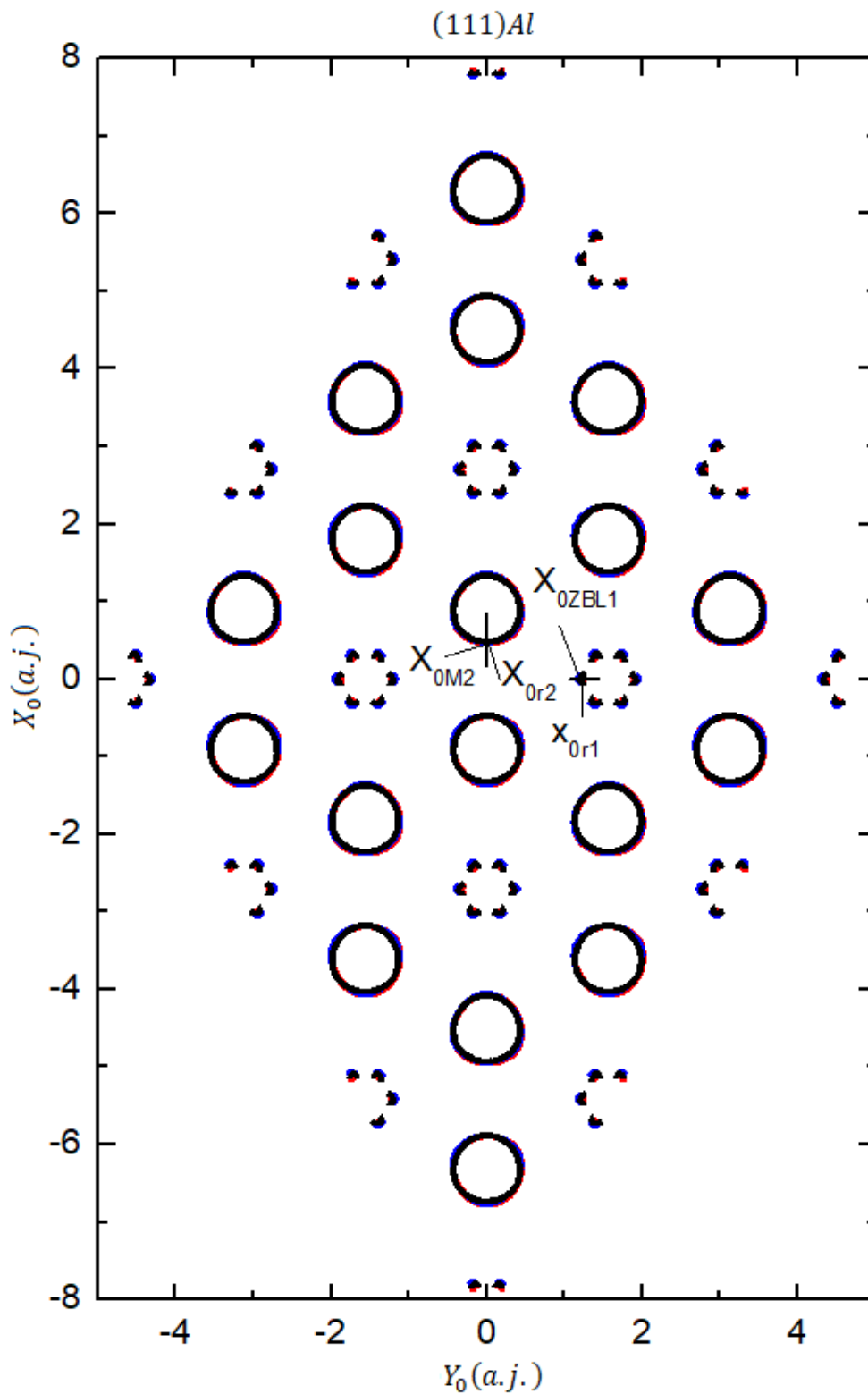


Слика 7.8. а) Линије дуге у равни угла расејања за ZBL потенцијал интеракције – црна линија, Молијеров потенцијал интеракције – плава линија и дугин потенцијал интеракције – црвена линија, за кристал алуминијума C^6 оријентације (001) у односу на снап протона енергија 2 MeV.

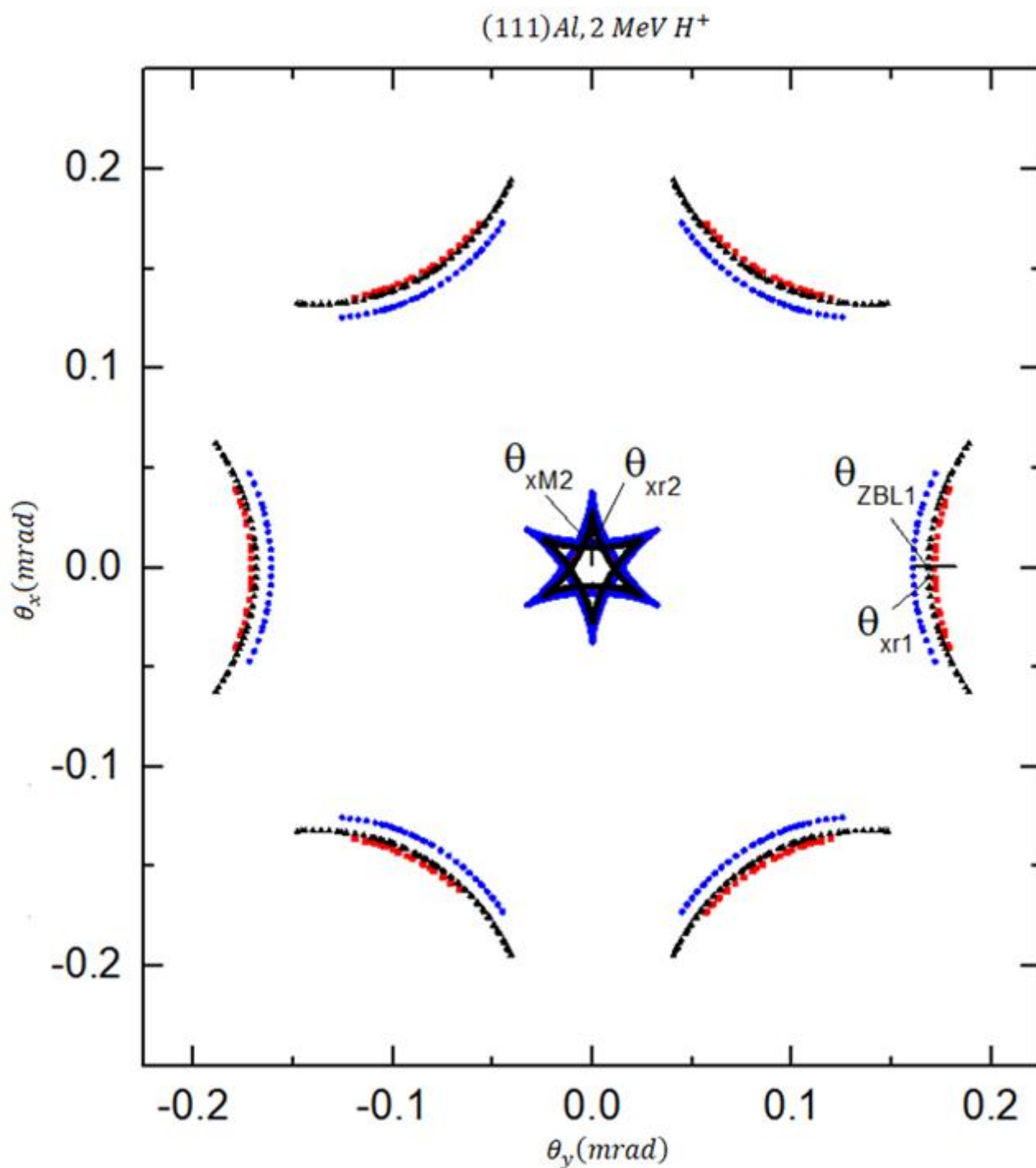


Слика 7.8. б) Увеличане унутрашње линије дуге за исти случај као на слици 7.8. а).

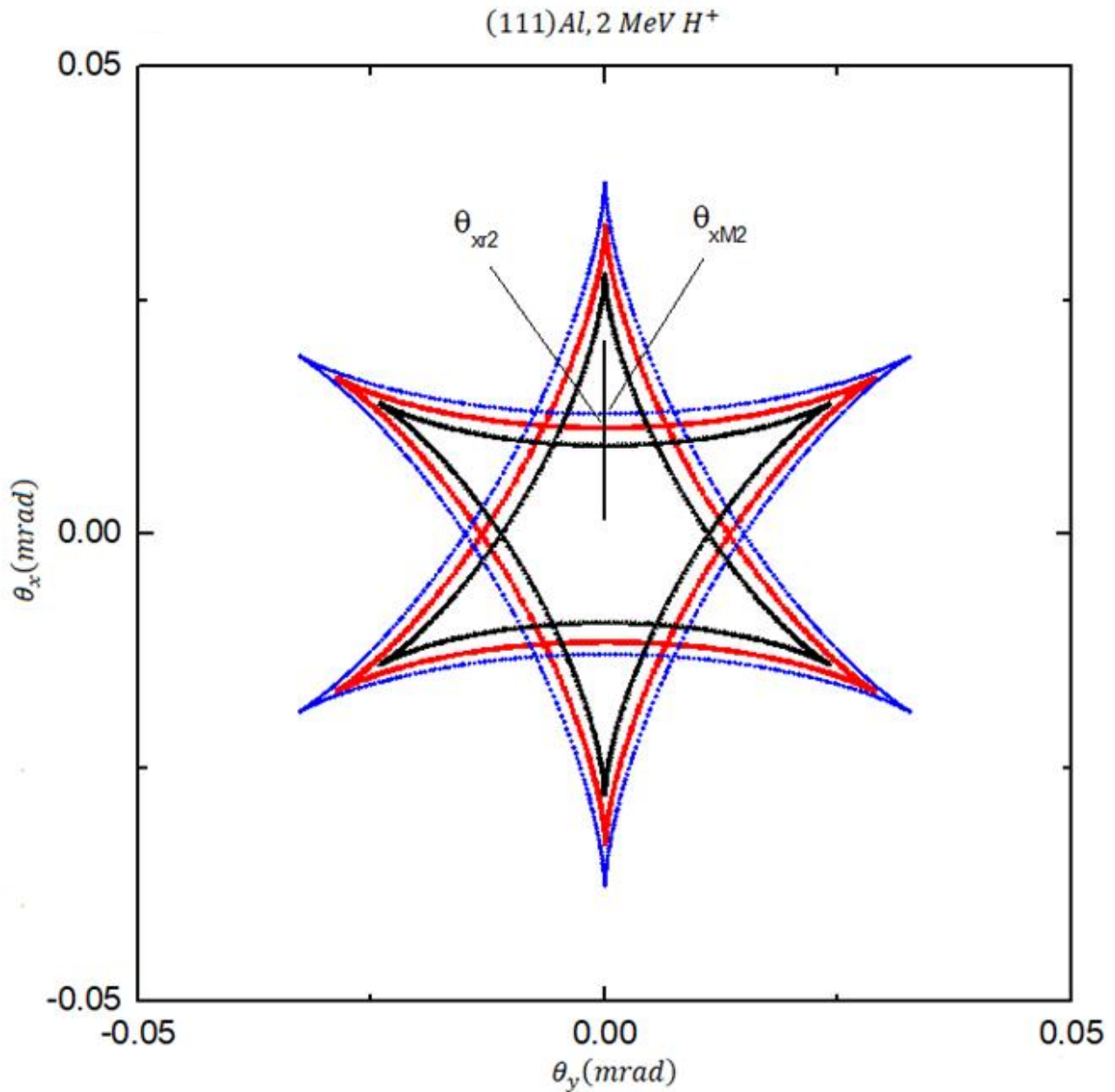
Слике 7.9, 7.10 (а) и 7.10 (б) приказују исто као и слике 7.6, 7.6 (а) и 7.6 (б) само за случај кристала алуминијума Al^{13} оријентације (111). Слика 7.10 (б) приказује само унутрашњи део линија дуге представљених на слици 7.10 (а). Као што је већ речено, случај кристала алуминијума Al^{13} је представљен зато што има највећу вредност параметра $R_{111} \leq 5\%$. Са слике 7.10 (б) се може приметити да главни део овог реалтивног одступања долази од унутрашњег дела линија дуге. Ово би се могло поправити одабиром друге карактеристичне тачке на линији дуге, или генерално говорећи, бољим глобалним поклапањем одговарајућих линија дуге. Ипак и поред тога може се рећи да је подударане између спољашње линије дуге са ZBL потенцијалом интеракције и унутрашње линије дуге са Молијеровим потенцијалом интеракције и одговарајућих линија дуге генерисаних помоћу дугиног потенцијала интеракције, веома добро, тј. задовољавајуће.



Слика 7.9. Линије дуге у равни ударног параметра за ZBL потенцијал интеракције – црна линија, Молијеров потенцијал интеракције – плава линија и дугин потенцијал интеракције – црвена линија, за кристал алуминијума Al^{13} оријентације (111) у односу на снап протона енергија $2 MeV$.

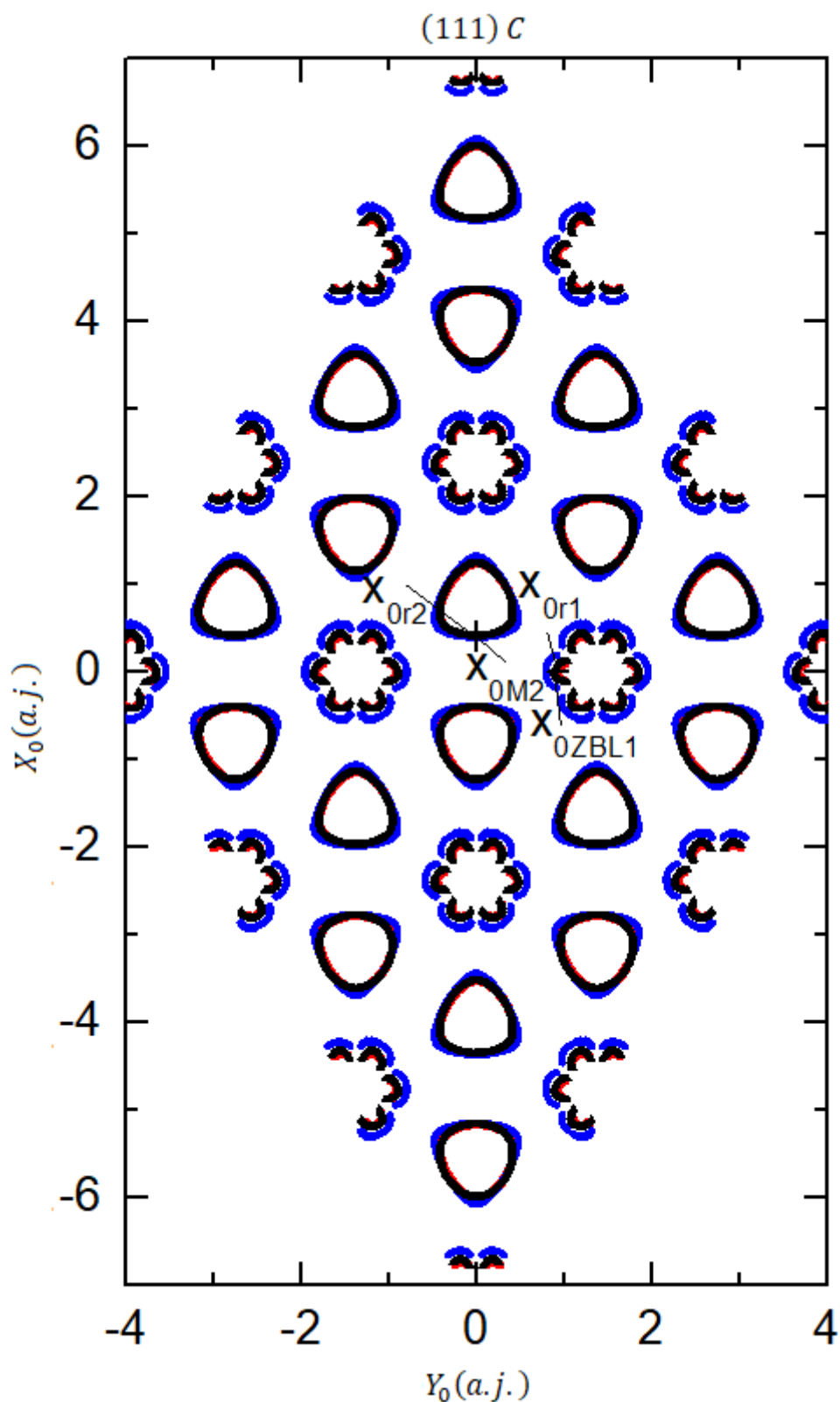


Слика 7.10. а) Линеје дуге у равни угла расејања за ZBL потенцијал интеракције – црна линија, Молијеров потенцијал интеракције – плава линија и дугин потенцијал интеракције – црвена линија, за кристал алуминијума Al^{13} оријентације (111) у односу на сноп протона енергија 2 MeV.

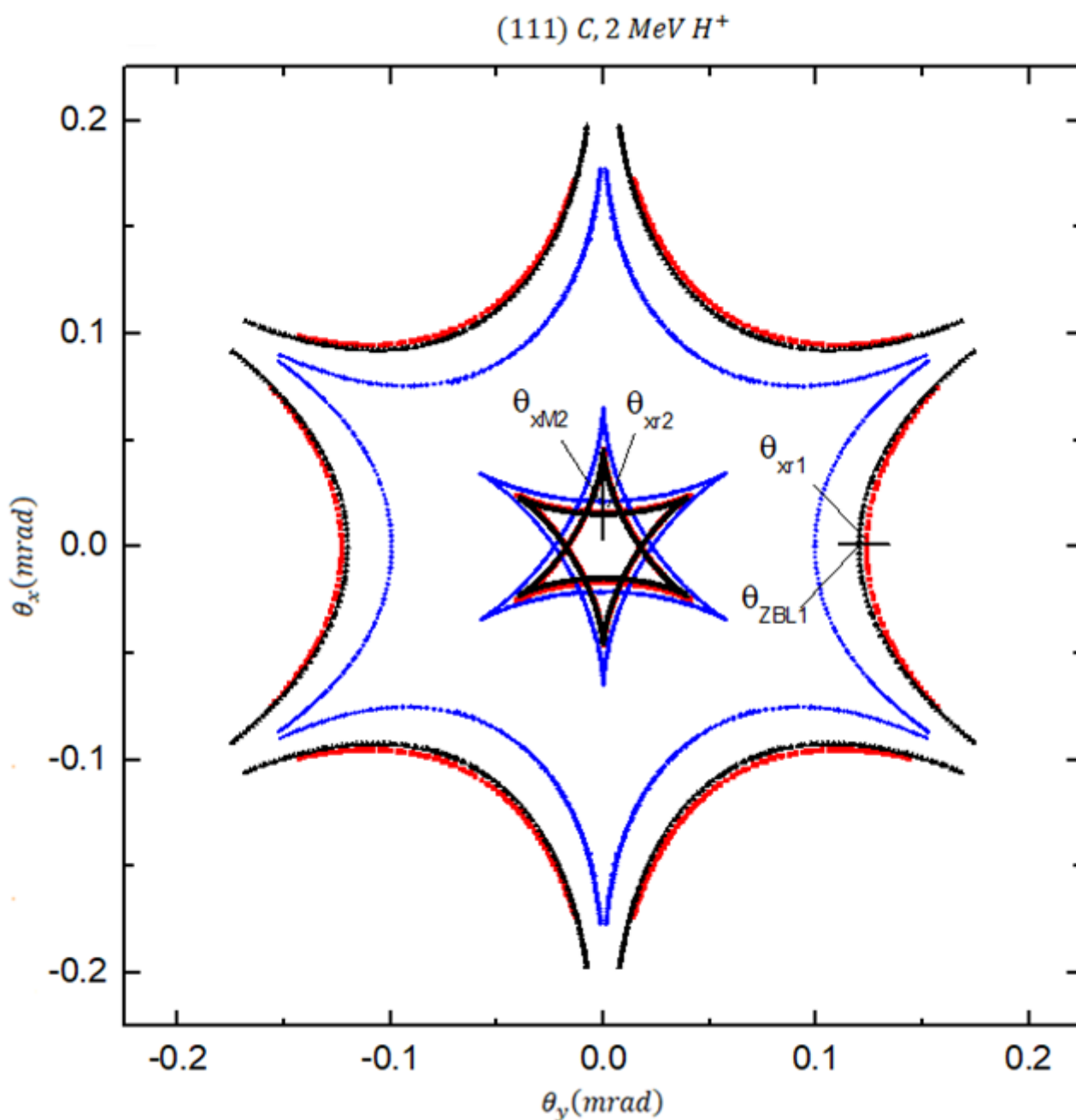


Слика 7.10. б) Увеличане унутрашње линије дуге за исти случај као на слици 7.10. а).

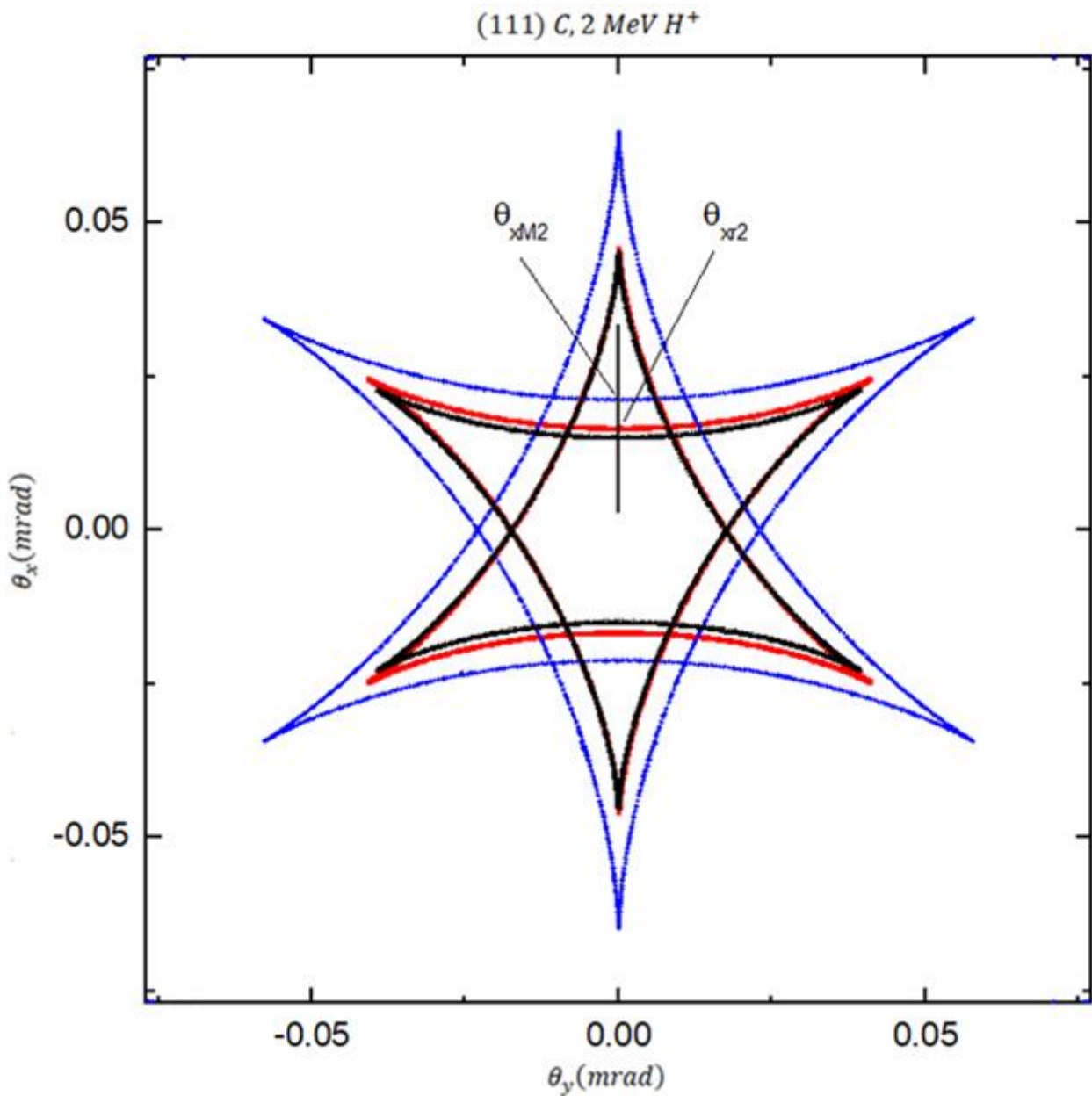
Слике 7.11, 7.12 (а) и 7.12 (б) приказују исто што и слике 7.7, 7.8 (а) и 7.8 (б) само за случај кристала угљеника/дијаманта C^6 у оријентацији (111). Такође и у овој оријентацији параметар R_{111} има веома већу вредност него за остале кристале, $R_{111} = 11\%$. Као и у случају кристала угљеника/дијаманта C^6 оријентације (001), само мењајући параметар фитовања δ'_2 , унутрашњу линију дуге генерисану помоћу дугиног потенцијала интеракције није могуће учинити блиском унутрашњој линији дуге генерисаној Молијеровим потенцијалом интеракције. Ова линија је и у овом случају веома блиска унутрашњој линији дуге генерисаној ZBL потенцијалом интеракције.



Слика 7.11. Линије дуге у равни ударног параметра за ZBL потенцијал интеракције – црна линија, Молијеров потенцијал интеракције – плава линија и дугин потенцијал интеракције – црвена линија, за кристал угљеника/дијаманта C^6 оријентације (111) у односу на сноп протона енергија 2 MeV .

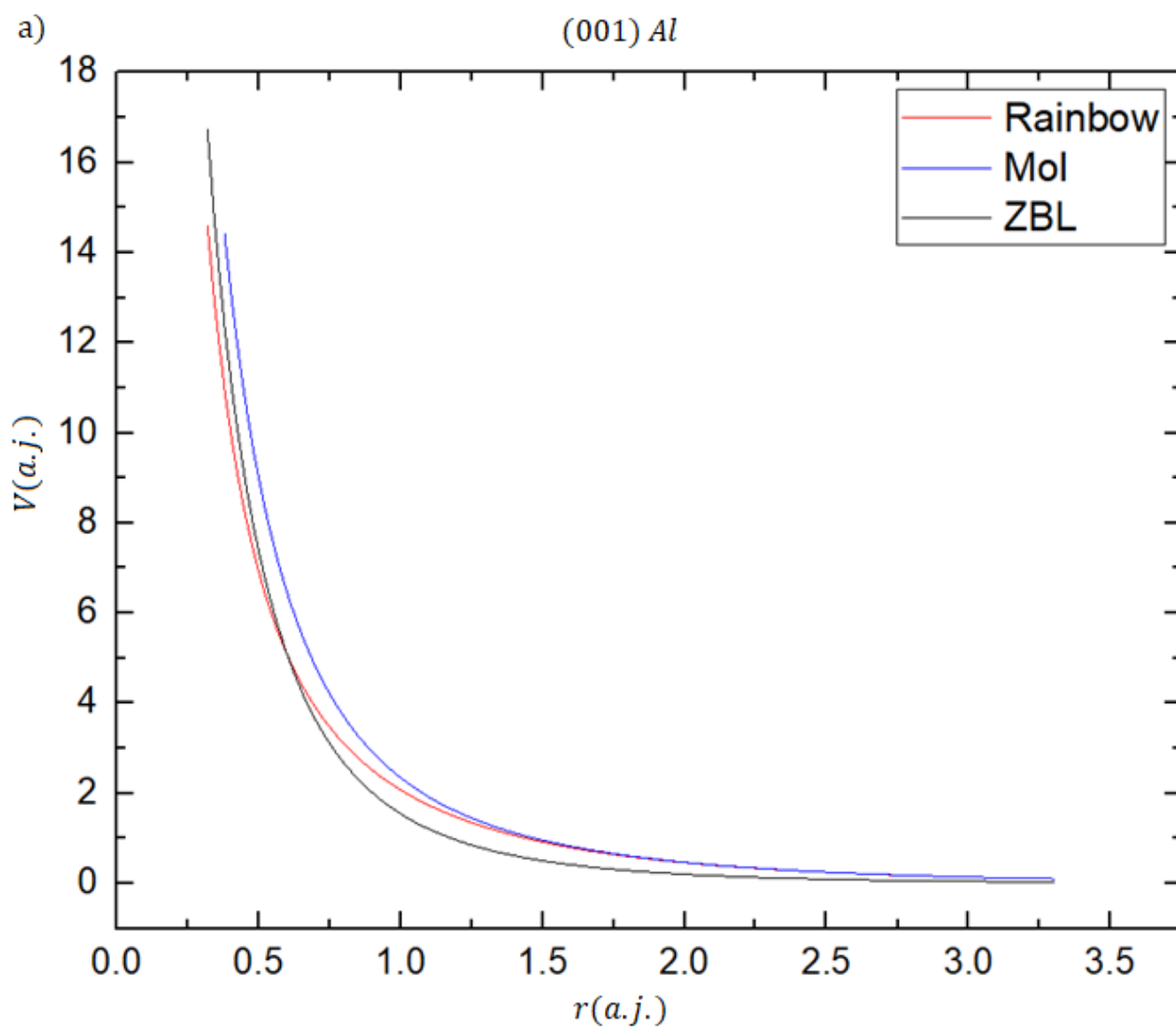


Слика 7.12. а) Линије дуге у равни угла расејања за ZBL потенцијал интеракције – црна линија, Молијеров потенцијал интеракције – плава линија и дугин потенцијал интеракције – црвена линија, за кристал угљеника/дијаманта C⁶ оријентације (111) у односу на снап протона енергија 2 MeV.

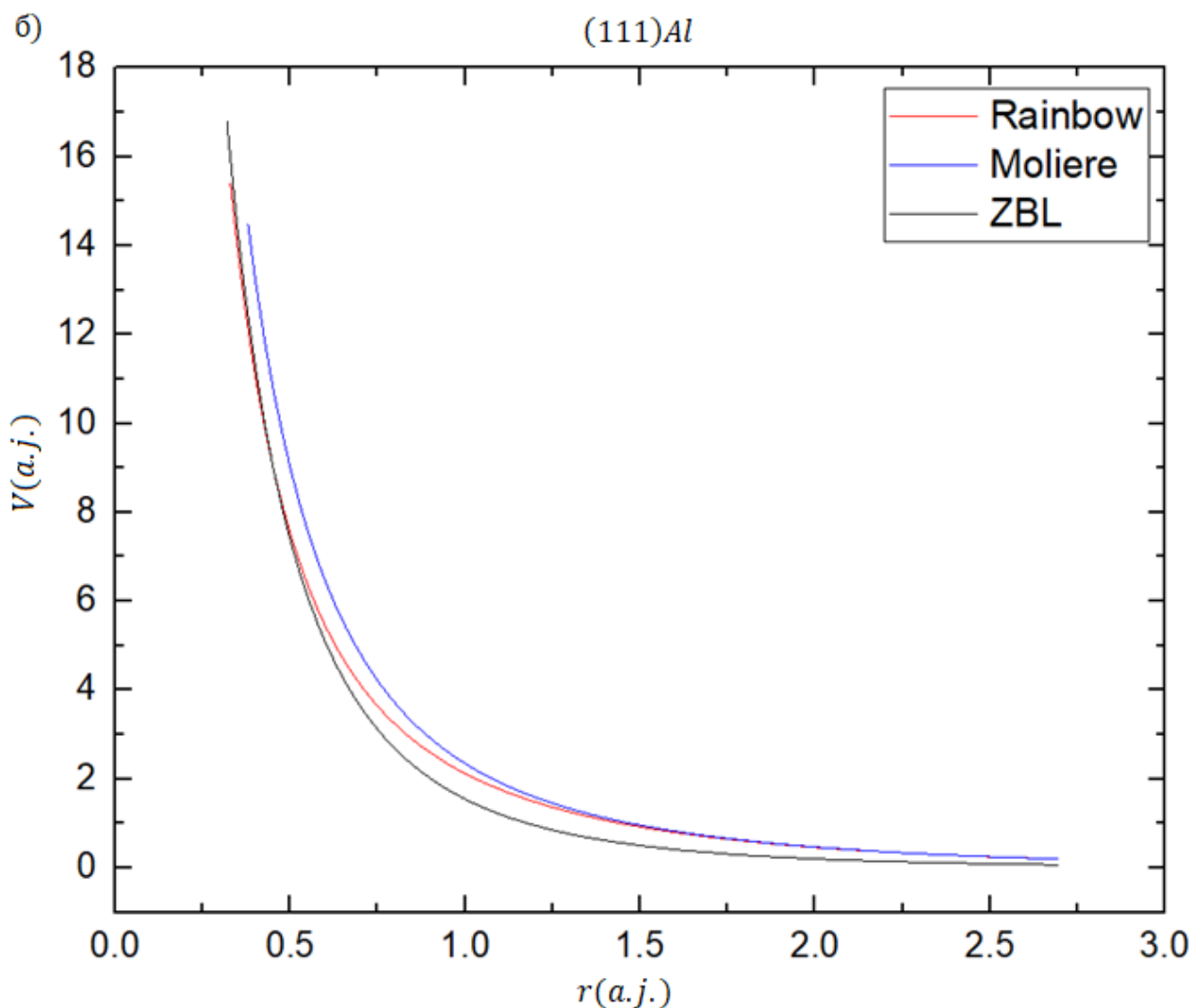


Слика 7.12. б) Увеличане унутрашње линије дуге за исти случај као на слици 7.12. а).

Зависност дугиног, Молијеровог и ZBL потенцијала интеракције од растојања за случај кристала алуминијума је приказана на слици 7.13 (а) и 7.13 (б) у оријентацијама (100) и (111), респективно. Ове слике очигледно показују и оправдавају наш побољшани приступ проблематици заснован на дугином морфолошком методу за добијање прецизног дугиног потенцијала интеракције. Са слика се види да дугин потенцијал веома добро подудара вредност ZBL потенцијала интеракције за мале ударне параметре и вредност Молијеровог потенцијала интеракције за велике ударне параметре.



Слика 7.13. а) ZBL потенцијал интеракције – црна линија, Молијеров потенцијал интеракције – плава линија и дугин потенцијал интеракције – црвена линија, за кристал алуминијума Al^{13} оријентације (001).

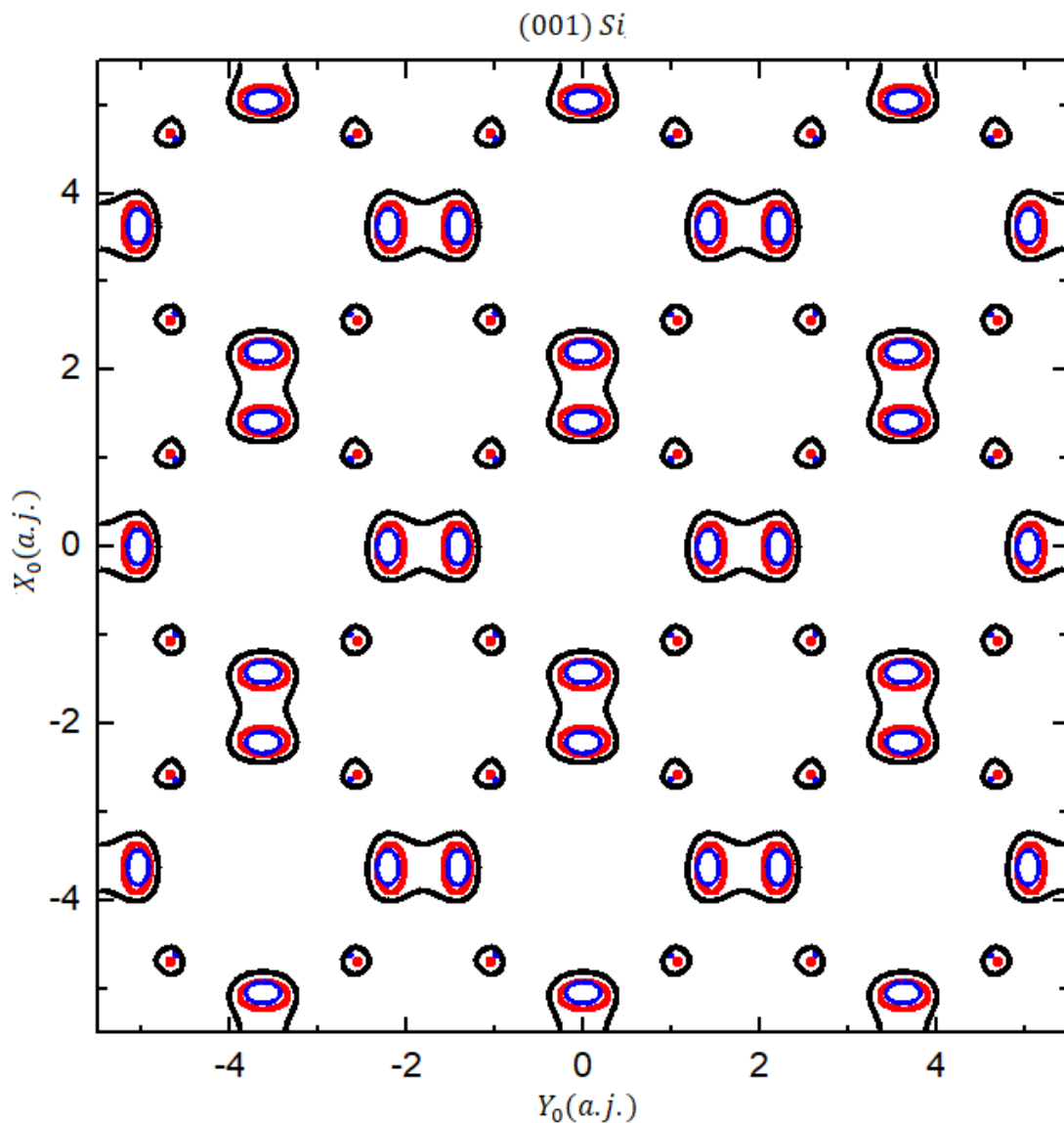


Слика 7.13. б) ZBL потенцијал интеракције – црна линија, Молијеров потенцијал интеракције – плава линија и дугин потенцијал интеракције – црвена линија, за кристал алуминијума Al^{13} оријентације (111).

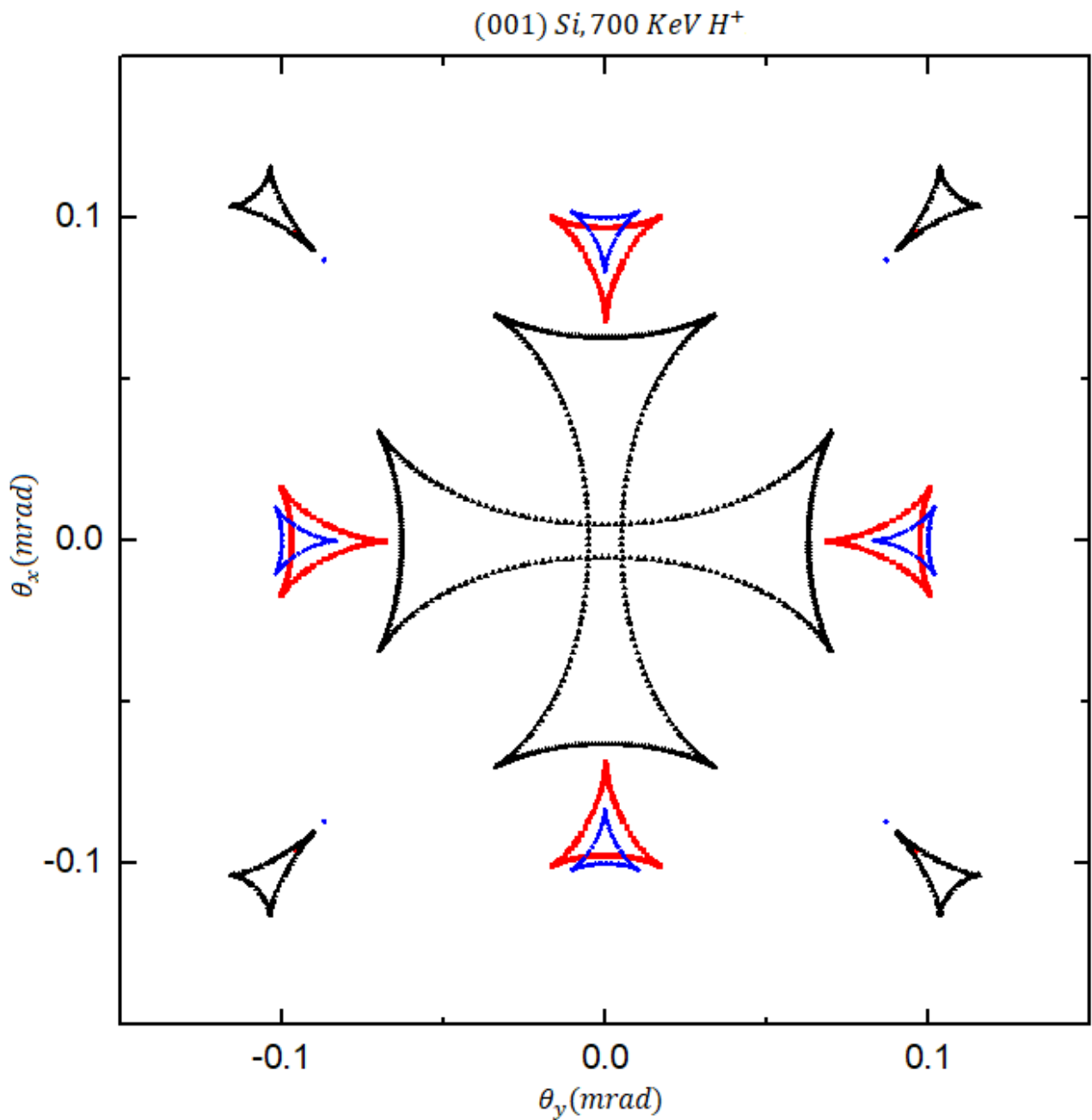
7.1. Зависност дугиног потенцијала интеракције од енергије протона

У експерименталном раду Сингапурске групе и њиховом заједничком раду са Винчанском групом [42], где је уведен дугин потенцијал интеракције, јасно је показано да се линије дуге генерисане коришћењем дугиног потенцијала интеракције одлично поклапају са експериментом за опсег енергија од $0.7 MeV$ до $2 MeV$. У даљем делу рада велики напор је уложен за испитивање да ли исти закључак може да се донесе и за остале кубне кристале који су испитивани у овом раду. Ова могућа енергијска зависност дугиног потенцијала интеракције је анализирана испитивањем еволуције линија дуге генерисаних коришћењем ZBL, Молијеровог и дугиног потенцијала интеракције за поменуте кристале у истом енергијском опсегу као и за кристал силицијума Si^{14} (осим за кристал угљеника/дијаманта C^6). Добијено понашање линија дуге је веома слично као и у случају силицијума Si^{14} и зависи од врсте кристала, тј. атомског броја атома кристала Z_2 и дебљине кристала. Ова зависност је илустрована на сликама 7.14 (а) и 7.14 (б), које приказују линије дуга за кристал силицијума Si^{14} оријентације (001) и за

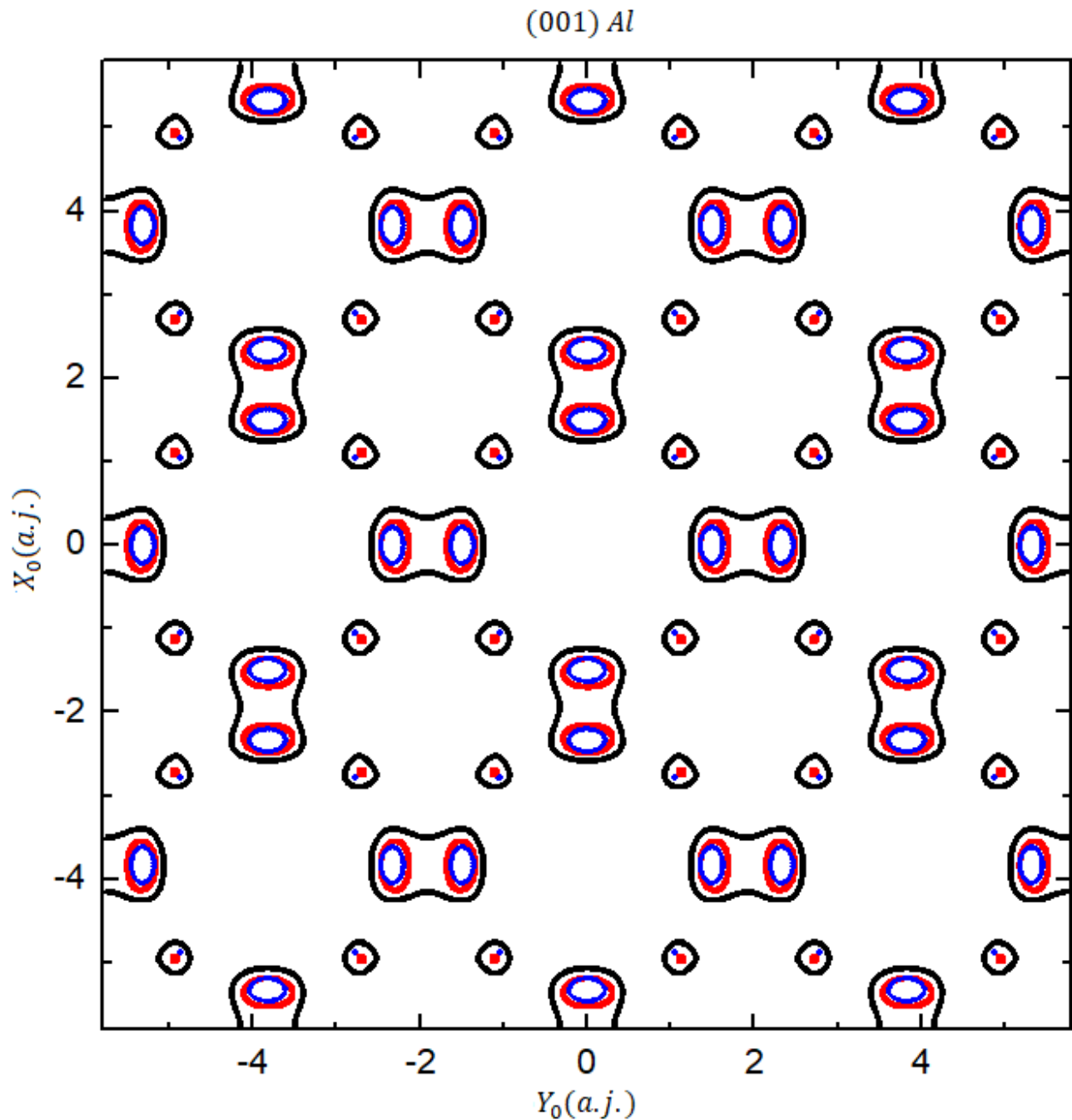
протоне енергија 700 KeV , као и на сликама 7.15 (а) и 7.15 (б) за кристал алуминијума Al^{13} и протоне енергија 750 KeV . Са ових слика се може приметити сличност између ових шаблона линија дуге. У поређењу са експерименталним резултатима (слика 5.8) за кристал силицијума оријентације (001) може се закључити да би ZBL потенцијал интеракције генерисао угаону дистрибуцију са централним пиком, док Молијеров потенцијал интеракције предвиђа осам спољних пикова без централног. Такође, са слика 5.8 и 5.10 се може закључити да дугин потенцијал интеракције очигледно боље репродукује експерименталне резултате него Молијеров потенцијал интеракције. Пошто ово конституише основану и јасну теоријску претпоставку, мерење угаоних расподела трансмитованих протона у сличном енергијском опсегу као за случај силицијума Si^{14} оријентације (001) би требало обавити и са другим кристалима у овој оријентацији, да би се оправдао наш закључак да је дугин потенцијал интеракције валидан у овом енергијском опсегу, тј. да параметри дугиног потенцијала не зависе од енергије јона.



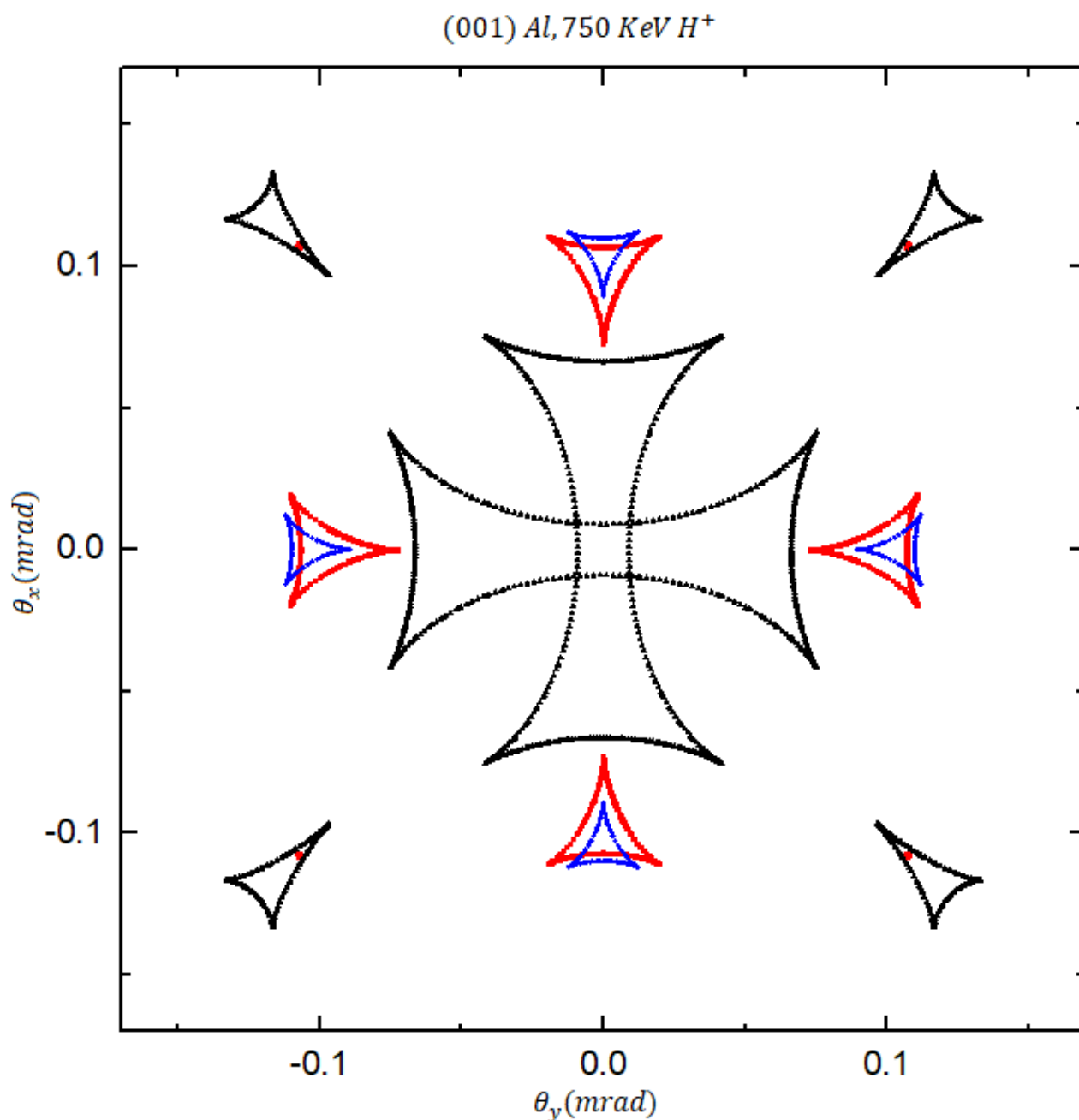
Слика 7.14. а) Линије дуге у равни ударног параметра за ZBL потенцијал интеракције – црна линија, Молијеров потенцијал интеракције – плава линија и дугин потенцијал интеракције – црвена линија, за кристал силицијума Si^{14} оријентације (001) у односу на снап протона енергије 700 KeV .



Слика 7.14. б) Линеје дуге у равни угла расејања за ZBL потенцијал интеракције – црна линија, Молијеров потенцијал интеракције – плава линија и дугин потенцијал интеракције – црвена линија, за кристал силицијума Si^{14} оријентације (001) у односу на сноп протона енергије 700 KeV.



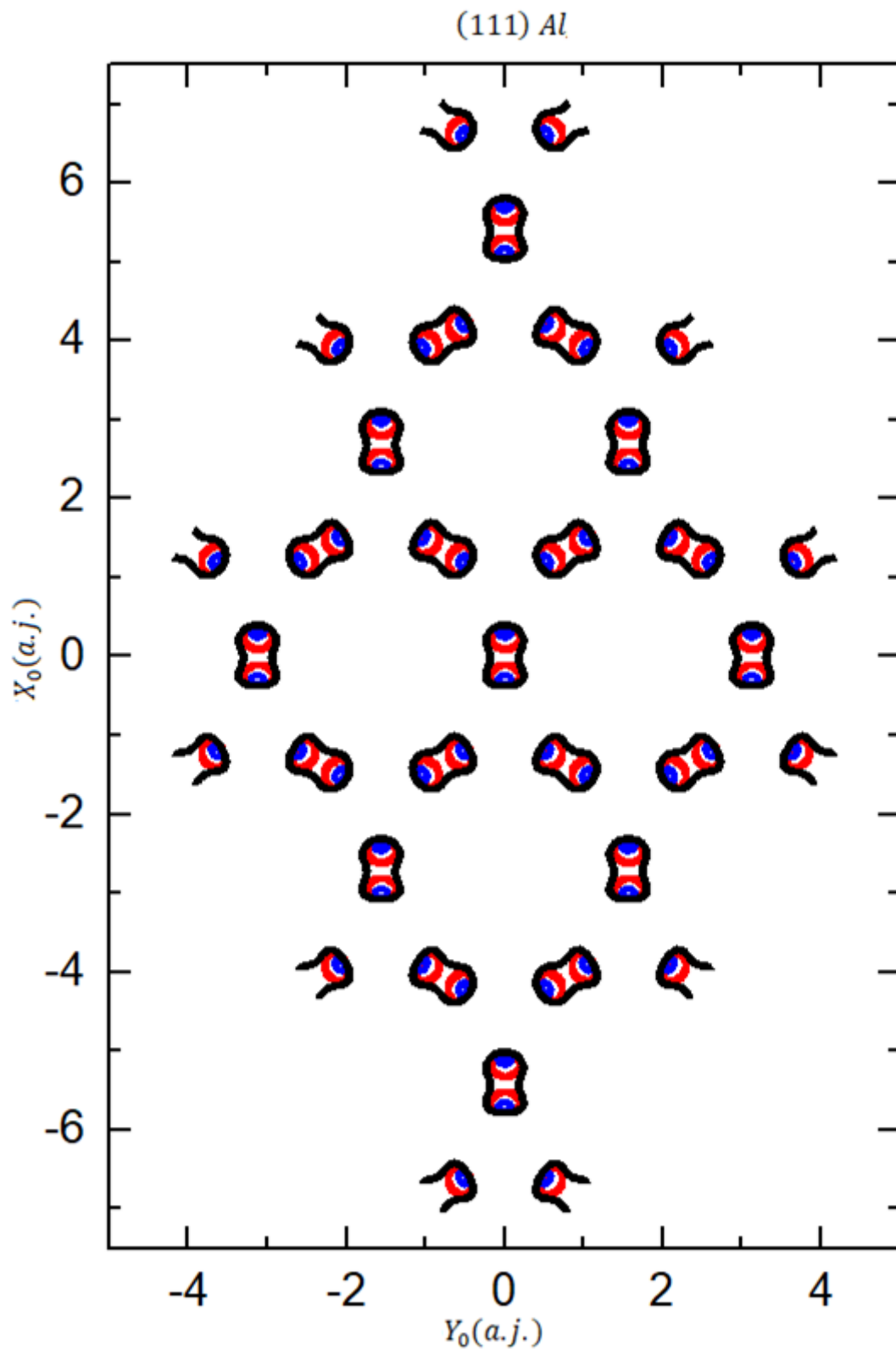
Слика 7.15. а) Линије дуге у равни ударног параметра за ZBL потенцијал интеракције – црна линија, Молијеров потенцијал интеракције – плава линија и дугин потенцијал интеракције – црвена линија, за кристал алуминијума Al^{13} оријентације (001) у односу на сноп протона енергије 750 KeV.



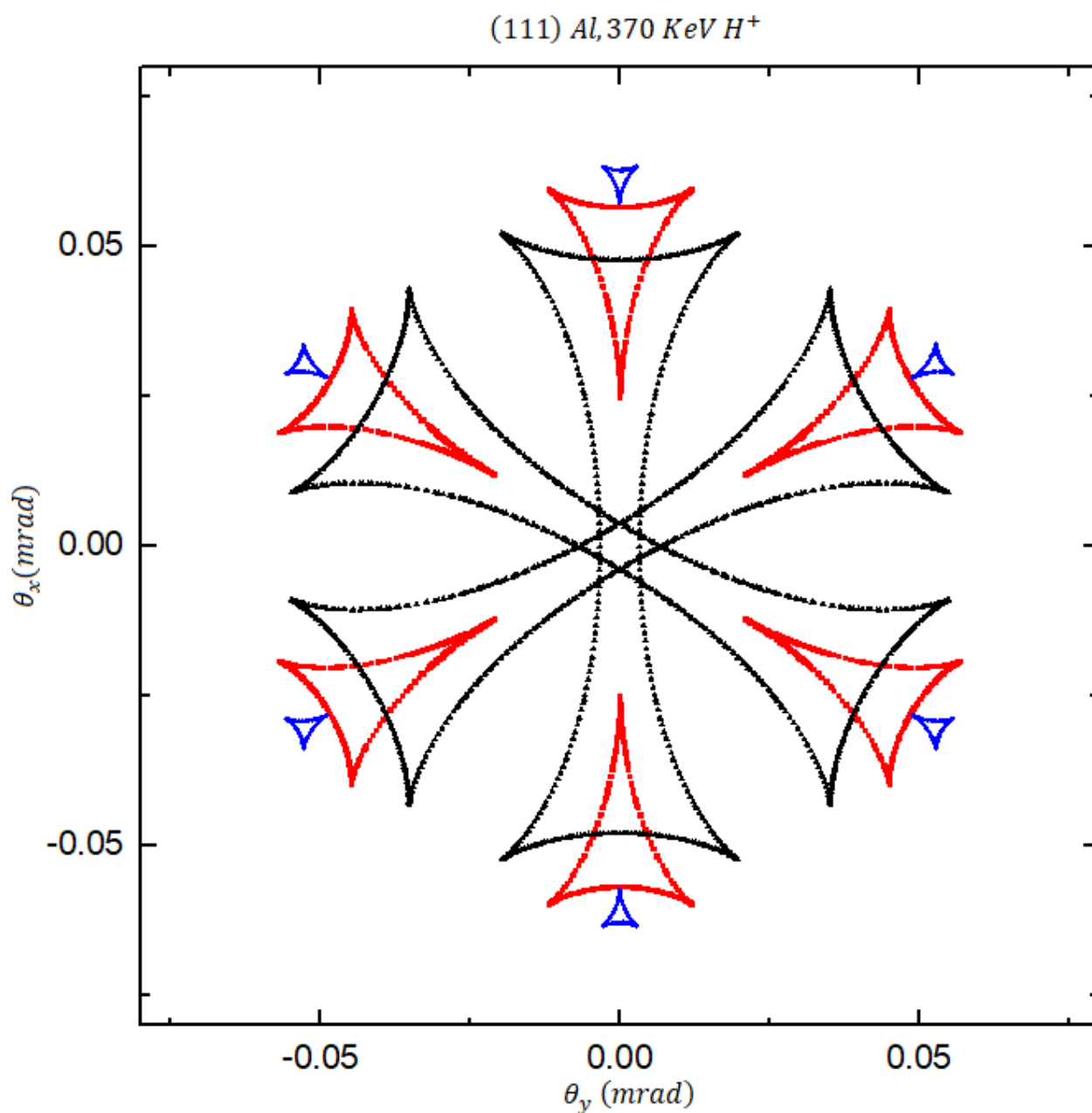
Слика 7.15. б) Линеје дуге у равни угла расејања за ZBL потенцијал интеракције – црна линија, Молијеров потенцијал интеракције – плава линија и дугин потенцијал интеракције – црвена линија, за кристал алуминијума Al^{13} оријентације (001) у односу на сноп протона енергије 750 KeV.

За кубне кристале оријентације (111) који су разматрани, нажалост, колико је аутору ове дисертације познато из литературе, за сада не постоје високорезолуциона мерења зависности угаоне расподеле од енергије каналисаних протона/јона. Због тога поређење између теорије и експеримената, као у случају кристала силицијума Si^{14} оријентације (001), није могуће. Са друге стране, у ранијем периоду, Винчанска група је проучавала зависност угаоне дистрибуције одговарајућих дуга у случају јона неона Ne^{10+} енергије 60 MeV трансмитоване кроз танак кристал силицијума оријентације (111), у зависности од његове дебљине [61]. Дебљина кристала је варирана у опсегу од 93.5 nm до 281 nm, што одговара опсегу редуковане дебљине

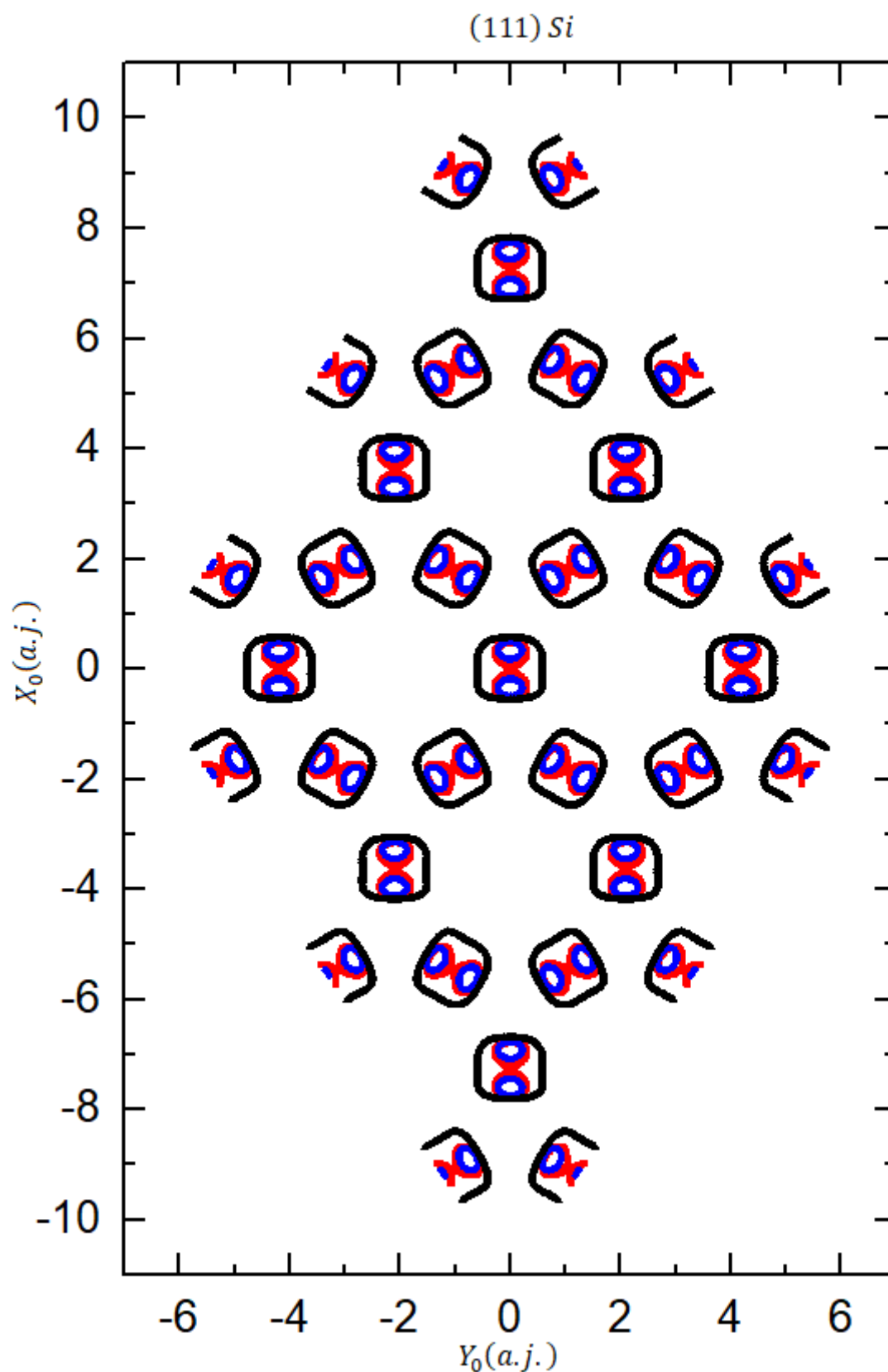
кристала Λ од 0.15 до 0.45 [39, 61]. Са претпоставком да брзина/енергија јона и дебљина кристала могу бити скалирани по закону редуковане дебљине кристала као $\Lambda = (f_p(q/m)^{1/2}L)/v_0$, где је f_p трансверзална фреквенција протона око осе канала, q је наелектрисање јона, m његова маса, L дебљина кристала, а v_0 почетна брзина јона [39], анализирали смо еволуције линија дуге генерисаних протонима трансмитованих кроз веома танке кубне кристалографске кристале оријентације (111) (осим за кристал угљеника/дијаманта C^6) у енергијском опсегу од 370 *KeV* до 2 *MeV*. Наш закључак, који би требало верификовати одговарајућим експериментима, је тај да еволуција линија дуге има слично понашање за све испитиване кристале. Сlike 7.16 (а) и 7.16 (б) приказују овај закључак у случају кристала алуминијума Al^{13} оријентације (111) и протона енергије 370 *KeV*, док сlike 7.17 (а) и 7.17 (б) приказују овај закључак за кристал силицијума Si^{14} оријентације (111) и протона енергије 370 *KeV*. Еволуција линија дуге приказује да случај кристала силицијума Si^{14} оријентације (111) претходи случају алуминијума Al^{13} исте оријентације, као и у случају оријентације дуж (001) осе.



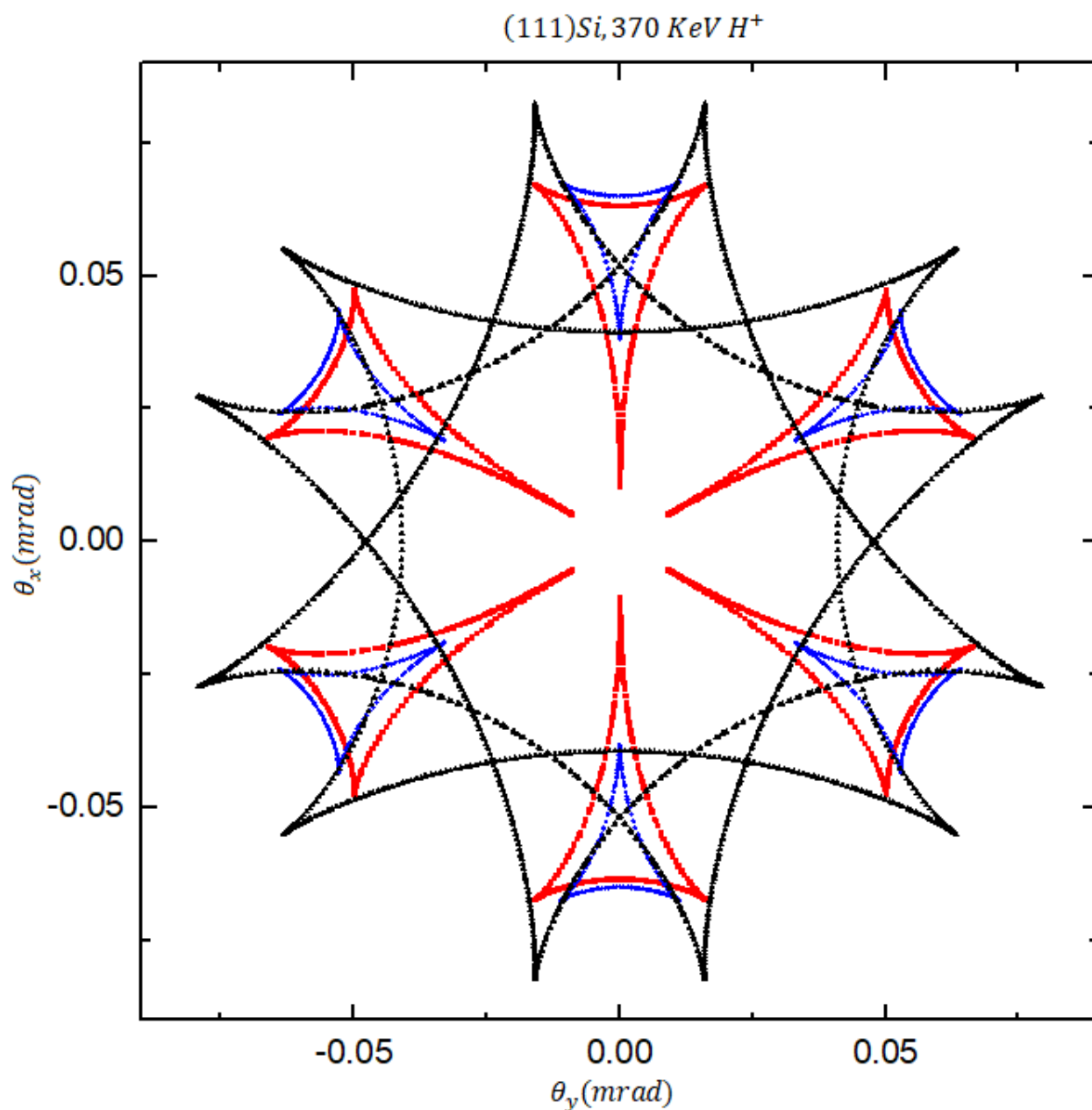
Слика 7.16. а) Линије дуге у равни ударног параметра за ZBL потенцијал интеракције – црна линија, Молијеров потенцијал интеракције – плава линија и дугин потенцијал интеракције – црвена линија, за кристал алуминијума Al^{13} оријентације (111) у односу на снап протона енергија 370 KeV.



Слика 7.16. б) Линеје дуге у равни угла расејања за ZBL потенцијал интеракције – црна линија, Молијеров потенцијал интеракције – плава линија и дугин потенцијал интеракције – црвена линија, за кристал алуминијума Al^{13} оријентације (111) у односу на сноп протона енергија 370 KeV.



Слика 7.17. а) Линије дуге у равни ударног параметра за ZBL потенцијал интеракције – црна линија, Молијеров потенцијал интеракције – плава линија и дугин потенцијал интеракције – црвена линија, за кристал силицијума Si^{14} оријентације (111) у односу на сноп протона енергија 370 KeV.



Слика 7.17. б) Линије дуге у равни угла расејања за ZBL потенцијал интеракције – црна линија, Молијеров потенцијал интеракције – плава линија и дугин потенцијал интеракције – црвена линија, за кристал силицијума Si^{14} оријентације (111) у односу на снап протона енергија 370 KeV.

Са слика 7.14 (а), 7.14 (б), 7.15 (а), 7.15 (б), 7.16 (а), 7.16 (б), 7.17 (а) и 7.17 (б) се може закључити да је еволуција линија дуге у потпуности одређена редукованом дебљином кристала Λ , барем у нерелативистичком режиму. Треба напоменути да је критични угао и угаона неодређеност условљена интеракцијом јона са електронима кристала и зависи од дебљине кристала и енергије јона. Зато треба очекивати да се за исто Λ појави разлика у угаоном скалирању (критични угао) и инхерентна резолуција (интеракција са електронима кристала) угаоне расподеле. Такође се претпоставља да се могу занемарити енергијски губитци трансмитованих јона у поређењу са њиховом почетном енергијом. Ово важи за мале вредности Λ (мање од 0.5), тј. за веома танке кристале или танке кристале у зависности од почетне енергије каналисаних јона.

Горе наведени аргументи се такође могу применити за веће енергије јона, изнад 2 MeV . У овом случају, коришћењем дебљих кристала може се постићи одговарајући критеријум за наш морфолошки приступ за јоне каналисане близу и далеко од атома кристала. Поред тога, ако би експериментални услови омогућили обављање високорезолуционих мерења угаоне расподеле јона са вишом енергијом, због чињенице да је при већим енергијама критични угао за каналисање мањи, овакви експерименти би били пожељнији него експерименти са јонима мање енергије, зато што критични угао за каналисање зависи од енергије као $\sim 1/\sqrt{E}$, док интеракција јона са електронима кристала зависи као $\sim 1/E$ [9].

И у случају оријентације кристала (111) као и у случају оријентације кристала (001), наш морфолошки метод се показао као добар за добијање прецизног јон - атом кристала потенцијала интеракције. Побољшани модел са одређеним критеријумом за мале и велике ударне параметре, који је подједнако третирао унутрашњу и спољашњу линију дуге увођењем релативне грешке и потпуно имплементирање Фирсовог радијуса екранирања је са великом прецизношћу одредио параметре фитовања потенцијала интеракције. Као резултат тога успели смо да конструишемо конзистентни универзални јон - кристал потенцијал интеракције за (001) кубне кристале (осим за кристал угљеника/дијаманта) и за (111) кубне кристале (осим за кристал угљеника/дијаманта). Треба напоменути да праметар фитовања за квадратне и троугаоне канале кубних кристала има различите вредности, 1.828 и 1.475, респективно. Добијени резултат се може приписати различитој геометрији канала и постојању неиндентичног критеријума за мале и велике ударне параметре. Ова чињеница такође указује на потребу за постојањем боље и универзалније методе за поклапање линија дуга, као и за додатним експерименталним резултатима угаоних расподела за различите комбинације јон - веома танки кристал у моду трансмитовања.

Разматрајући могућу енергијску зависност дугиног потенцијала интеракције, анализа и њени аргументи јако указују на то да у опсегу енергија од неколико стотина KeV -а до десетина MeV -а, параметри фитовања дугиног потенцијала интеракције не зависе од енергије јона.

8. ЗАКЉУЧАК

Ефекат кристалне дуге, који се јавља при каналисању позитивних јона кроз оријентисане кубне кристале у односу на сноп јона, је употребљен за одређивање прецизног јон - атом потенцијала интеракције. Овако добијен потенцијал назван је дугин потенцијал интеракције. Конструисање дугиног потенцијала интеракције је обављено модификацијом Молијеровог потенцијала интеракције, који је добијен на основу аналитичке апроксимације Томас - Фермијевог модела атома, са Фирсовим радијусом екранирања. Основа за ову модификацију је била модификација линија дуге у равни ударног параметра, пошто је показано да оне представљају „скелет“ угаоне расподеле трансмитованих јона. Дакле, ради се о морфолошком (геометријском) методу.

Молијеров потенцијал са Томас - Фермијевим радијусом екранирања се експериментално показао прецизним за описивање каналисања јона када већина трансмитованих јона који генеришу угаону расподелу потичу из области око средине канала. Са друге стране, ZBL потенцијал интеракције показао се прецизним у близини атома кристала, односно у близини атомских низова кристала. Начин добијања дугиног потенцијала састоји се од модификације Молијеровог потенцијала интеракције са Фирсовим радијусом, тако да његова линија дуге око средине канала буде добра апроксимација линије дуге добијене полазећи од Молијеровог потенцијала интеракције са Томас - Фермијевом функцијом екранирања и истовремено да буде добра апроксимација спољашње линије дуге, ближе атомским низовима, генерисане помоћу ZBL потенцијала интеракције. Показано је да је ова процедура успешна променом само једног фитинг параметра у Молијеровом потенцијалу у случају 2 MeV протона и 55 nm танког кристала (001) силицијума! Ово је потврђено експериментално за енергије протона од 2 MeV , 1.5 MeV , 1 MeV и 0.7 MeV . На овај начин је добијен потенцијал интеракције који је прецизан у целом домену ударног параметра протона у односу на атом силицијума.

Основни допринос ове дисертације је у томе што је показано да се морфолошки метод за добијање прецизног дугиног потенцијала, осим у случају угљеника односно дијаманта, може успешно применити за 27 кубних кристала: FCC кристалне структуре, алуминијум Al^{13} , калцијум Ca^{20} , никл Ni^{28} , бакар Cu^{29} , стронцијум Sr^{38} , родијум Rh^{45} , паладијум Pd^{46} , злато Au^{79} , олово Pb^{82} и торијум Th^{90} ; BCC кристалне структуре: ванадијум V^{23} , хром Cr^{24} , гвожђе Fe^{26} , ниобијум Nb^{41} , молибден Mo^{42} , баријум Ba^{56} , еуропијум Eu^{63} , танталијум Ta^{73} и волфрам W^{74} ; и са дијамантском кристалографском структуром: силицијум Si^{14} , германијум Ge^{32} и калај Sn^{50} , у случају оријентација (001) и (111) у односу на протонски сноп енергије 2 MeV . У случају угљеника односно дијаманта морфолошки метод није био довољно успешан што је последица чињенице да угљеник има мали атомски број Z_2 , због чега потенцијал интеракције Кулоновог типа са функцијом екранирања Томас - Ферми типа у његовом случају није задовољавајући, као и зато што су због јаких веза угљеникових атома квадратни и троугаони канали мали у случајевима оријентације кристала (001) и (111), респективно.

Посебан резултат ове дисертације је чињеница да је параметар фитовања $\delta_2^{r'}$ у изразима за дугине потенцијале исти: $V_{100}(R) = (Z_1 Z_2 e^2 / R) \sum_{i=1}^3 \gamma_i e^{-(\delta_i^{r'} R / a_F)}$, где је $\delta_i^{r'} = \left[\left(Z_2^{1/3} / (Z_1^{1/2} + Z_2^{1/2}) \right)^{-2/3} \right] 6.0, 1.828, \left(Z_2^{1/3} / (Z_1^{1/2} + Z_2^{1/2}) \right)^{-2/3} 0.3$ и $V_{111}(R) =$

$(Z_1 Z_2 e^2 / R) \sum_{i=1}^3 \gamma_i e^{-(\delta_i^{r'} R / a_F)}$, где је $\delta_i^{r'} = \left[\left(Z_2^{1/3} / (Z_1^{1/2} + Z_2^{1/2})^{-2/3} \right) 6.0, 1.475, \left(Z_2^{1/3} / (Z_1^{1/2} + Z_2^{1/2})^{-2/3} \right) 0.3 \right]$ за све кубне кристале (001) и (111) оријентације у односу на снап протона и износи 1.828 и 1.475, респективно. Мала разлика између ова два параметра може се објаснити као последица различите геометрије квадратног и троугаоног канала.

Анализа могуће енергијске зависности дугиног потенцијала интеракције, указује на то да у опсегу енергија од неколико стотина *KeV* до десетина *MeV* параметри фитовања дугиног потенцијала интеракције не зависе од енергије јона.

Ако би се морфолошки метод заснован на ефекту дуге показао успешним за кубне кристале оријентације (011) могуће би било конструисати дугин јон - кристал потенцијал интеракције за сва три главна кристалографска правца. Прелиминарни резултати дају јасне индикације да је ово могуће [63, 64] као и да је вредност параметра $\delta_2^{r'}$ у том случају блиска вредностима за квадратни и троугаони канал кубних кристала [26].

9. ЛИТЕРАТУРА

1. H. A. Bumstead, The history of physics, The Scientific Monthly, 12, 4, 289-309, (1921).
2. J. Z. Buchwald, R. Fox, The history of physics, Oxford University Press, (2013).
3. J. S. Rigden, Building blocks of matter: a supplement to the MacMillan encyclopedia of physics, The Gale Group Inc, (2003).
4. N. W. Ashcroft, N. D. Mermin, Solid state physics, Saunders College Publishing, New York, (1976).
5. J. R. Hook, H. E. Hall, Solid state physics, John Wiley & Sons, (1974).
6. J. Dojčilović, Fizika čvrstog stanja, Fizički Fakultet, Univerzitet u Beogradu, (2007).
7. C. Kittel, Introduction to solid state physics, John Wiley & Sons Inc, (2005).
8. L. C. Feldman, J. W. Mayer, S. T. Picarux, Materials analysis by ion channeling, Academic Press, New York, (1982).
9. D. S. Gemmell, Channeling and related effects in the motion of charged particles through crystals, Rev. Mod. Phys., 46, 129, (1974).
10. N. Nešković, Rainbow effect in ion channeling, Phys. Rev. B, 33, 6030, (1986).
11. J. Stark, G. Wendt, Über das Eindringen von kanalstrahlen in feste korper, Ann. Phys., 38, 921, (1912).
12. J. A. Davies, J. Friesen, J. D. McIntyre, A radiochemical technique for studying range-energy relationships for heavy ions of keV energies in aluminum, Can. J. Chem, 38, 1526, (1960).
13. M. T. Robinson, O. S. Oen, Computer studies of the slowing down of energetic atoms in crystals, Phys. Rev, 132, 2385, (1963).
14. J. Lindhard, Influence of crystal lattice on motion of energetic charged particles, K. Dan. Vidensk. Selsk. Mat.-Fys. Medd, 34, (14), 1-64, (1965).
15. H. F. Krause, S. Datz, P. F. Dittner, J. Gomez del Campo, P. D. Miller, C. D. Moak, N. Nešković, P. L. Pepmiller, Rainbow effect in axial ion channeling, Phys. Rev. B, 33, 6036, (1986).
16. S. Petrović, L. Miletić, N. Nešković, Theory of rainbows in thin crystals: The explanation of ion channeling applied to Ne¹⁰⁺ ions transmitted through a <100> Si thin crystal, Phys. Rev. B, 61, 184, (2000).
17. I. Newton, Optice: Sive de reflexionibus, refractionibus, inflexionibus & coloribus lucis libri tres, propositio II, experimentum, VII edition, (1740).
18. H. M. Nussenzveig, The theory of the rainbow, Sci. Am, 236, 116, (1977).
19. O. B. Firsov, Determination of the forces acting between atoms using the differential effective cross-section for elastic scattering, Zh. Eksp. Teor. Fiz., 24, 279, (in Russian), (1953).
20. D. Beck, Wide-angle scattering in molecular beams, the rainbow effect, J. Chem. Phys., 37, 2884, (1962).
21. N. S. Wall, J. R. Rees, K. W. Ford, Elastic scattering of 22-MeV alpha particles, Phys. Rev., 97, 726, (1955).
22. J. D. McClure, Surface rainbows: A similitude between classical and diffractive scattering of atoms from crystalline surfaces, J. Chem. Phys., 52, 2712, (1970).
23. S. Petrović, D. Borka, N. Nešković, Rainbows in transmission of high energy protons through carbon nanotubes, Eur. Phys. J. B., 44, 41, (2005).
24. S. Petrović, M. Ćosić, N. Nešković, Quantum rainbow channeling of positrons in very short carbon nanotubes, Phys. Rev. A, 88, 012902, (2013).

25. M. Ćosić, S. Petrović, N. Nešković, Quantum rainbow characterization of short chiral carbon nanotubes, *Nucl. Inst. Methods Phys. Res. B*, 323, 30–35, (2014).
26. N. Nešković, S. Petrović, M. Ćosić, Rainbows in channeling of charged particles in crystals and nanotubes, *Lecture Notes in Nanoscale Science and Technology*, Volume 25, Springer, (2017).
27. N. Bohr, The penetration of atomic particles through matter, *K. Dan. Vidensk. Selsk. Mat.- Fys. Medd.*, 18, (8), 1–144, (1948).
28. G. Moliere, Theorie der Streuung schneller geladener Teilchen I: Einzelstreuung am abgeschirmten Coulomb-feld, *Z. Naturforsch., A*, 2, 133, (1947).
29. J. F. Ziegler, J. P. Biersack, U. Littmark, The stopping and range of ions in solids, Pergamon Press, New York, (1985).
30. O. B. Firsov, Calculation of the interaction potential of atoms, *Sov. Phys. – JETP*, 6, 534, (1958).
31. B. R. Appleton, C. Erginsoy, H. E. Wegner, W. M. Gibson, Channeling effects in the energy loss of 3–11 MeV protons in silicon and germanium single crystals, *Phys. Rev.*, 161, 330, (1967).
32. M. Erić, Doktorska Disertacija, Elektrotehnicki fakultet, Univerzitet u Beogradu, (2014).
33. K. W. Ford, J. A. Wheeler, Semiclassical description of scattering, *Ann. Phys.*, New York, 7, 259, (1959).
34. N. F. Shul'ga, V. I. Truten, S. P. Fomin, Orientation effects in interaction of highenergy particles with strings of atoms in a crystal, *Phys. JETP*, 60, 145, (1984).
35. S. Gorodetzky, A. Pape, E. L. Cooperman, A. Chevallier, J. C. Sens, and R. Armbruster, Pouvoir d'arret du germanium pour des protons d'energie comprise entre 0.35 et 5.5 MeV, *Nucl. Inst. Methods*, 70, 11, (1969).
36. M. R. Motapothula, M. B.H. Breese, A study of small impact parameter ion channeling effects in thin crystals, *Eur. Phys. J. B*, 91(3), 49, (2018).
37. M. Ćosić, S. Petrović, N. Nešković, The forward rainbow scattering of low energy protons by a graphene sheet, *Nucl. Inst. Methods Phys. Res. B*, 422, 54–62, (2018).
38. Y. N. Demkov, The classical problem of conformal small-angle scattering, *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* 80, 127–143, (1981) [*Sov. Phys.-JETP*, 53, 63 (1981)].
39. H. F. Krause, J. H. Barrett, S. Datz, P. F. Dittner, N. L. Jones, J. Gomez del Campo, C. R. Vane, Angular distribution of ions axially channeled in a very thin crystal: Experimental and theoretical results, *Phys. Rev. A*, 49, 283, (1994).
40. W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling, B. P. Flannery, Numerical recipes in C, The Art of Scientific Computing, Second Edition, Cambridge University Press, (1992).
41. D. Krpić, Uvod u numeričku fiziku, Fizički Fakultet, Univerzitet u Beogradu, (1998).
42. S. Petrović, N. Nešković, M. Ćosić, M. Motapothula, M.B.H. Breese, Proton–silicon interaction potential extracted from high-resolution measurements of crystal rainbows, *Nucl. Inst. Methods Phys. Res. B*, 360, 23–29, (2015).
43. J. H. Barrett, Monte carlo channeling calculations, *Phys. Rev. B*, 3, 1527, (1971); J. H. Barrett, Methods of channeling simulation, *Nucl. Inst. Methods Phys. Res. B*, 44, 367, (1990).
44. Z. Y. Dang, M. Motapothula, Y. S. Ow, T. Venkatesan, M. B. H. Breese, M. A. Rana, A. Osman, Fabrication of large-area ultra-thin single crystal silicon membranes, *Appl. Phys. Lett.*, 99, 223105, (2011).

45. M. Motapothula, Z. Y. Dang, T. Venkatesan, M. B. H. Breese, M. A. Rana, A. Osman, Axial ion channeling patterns from ultra-thin silicon membranes, Nucl. Inst. Methods Phys. Res. B, 283, 29, (2012).
46. M. Motapothula, Z. Y. Dang, T. Venkatesan, M. B. H. Breese, M. A. Rana, A. Osman, Influence of the narrow {111} planes on axial and planar ion channeling, Phys. Rev. Lett, 108, 195502, (2012).
47. M. Motapothula, S. Petrović, N. Nešković, Z. Y. Dang, M. B. H. Breese, M. A. Rana, and A. Osman, Origin of ringlike angular distributions observed in rainbow channeling in ultrathin crystals, Phys. Rev. B, 86, 205426, (2012).
48. M. Motapothula, Z. Y. Dang, T. Venkatesan, M. B. H. Breese, A study of ion channeling patterns at minor axes in silicon, Nucl. Inst. Methods Phys. Res. B, 330, 24, (2014).
49. M. B. H. Breese, D. N. Jamieson, P. J. C. King, Materials analysis using a nuclear microprobe, John Wiley & Sons Inc, New York, (1996).
50. P. J. M. Smulders, D. O. Boerma, Computer simulation of channeling in single crystals, Nucl. Inst. Methods Phys. Res. B, 29, 471, (1987).
51. P. J. M. Smulders, D. O. Boerma, M. Shaanan, Lattice site location of Te in GaAs, Nucl. Inst. Methods Phys. Res. B, 45, 450, (1990).
52. J. S. Rosner, W. M. Gibson, J. A. Golovchenko, A. N. Goland, H. E. Wegner, Quantitative study of the transmission of axially channeled protons in thin silicon crystals, Phys. Rev. B, 18, 1066, (1978).
53. M. Motapothula, S. Petrović, N. Nešković, Z. Y. Dang, M. B. H. Breese, M. A. Rana, and A. Osman, Origin of ringlike angular distributions observed in rainbow channeling in ultrathin crystals, Phys. Rev. B, 86, 205426, (2012).
54. S. Petrović, N. Starčević, M. Ćosić, N. Nešković, On the doughnut effect and the rainbow proton-silicon interaction potential, Advanced Ceramics and Applications, edited by R. Gadow, V. V. Mitic, Berlin, Boston: De Gruyter, pp. 271-276, (2021).
55. R. Thom, Structural stability and morphogenesis, Benjamin, Reading, (1975).
56. S. Petrović, N. Starčević, M. Ćosić, Universal axial (001) rainbow channeling interaction potential, Nucl. Inst. Methods Phys. Res. B, 447, 79, (2019).
57. X. Artru, S. P. Fomin, N. F. Shul'ga, K. A. Ispirian, N. K. Zhevago, Carbon nanotubes and fullerites in high-energy and X-ray physics, Phys. Rep., 412, (2-3) 89-189, (2005).
58. P. A. Doyle, P. S. Turner, Relativistic Hartree-Fock X-ray and electron scattering factors, Acta Cryst. A, 24, (3), 390-397, (1968).
59. N. K. Zhevago, V. I. Glebov, Channeling of fast charged and neutral particles in nanotubes, Phys. Lett. A, 250, (4-6), 360-368, (1998).
60. Z. L. Mišković, Ion channeling through carbon nanotubes, Radiat. Eff. Defects Solids, 162, (3-4), 185-205, (2007).
61. N. Nešković, S. Petrović, L. Živković, Rainbows with a $\langle 111 \rangle$ Si thin crystal, Eur. Phys. J. B, 18, 553, (2000).
62. N. Starčević, S. Petrović, Crystal rainbow channeling potential for (001) and (111) cubic crystallographic crystals, Nucl. Inst. Methods Phys. Res. B, 499, 39-45, (2021).
63. S. Petrović, N. Starčević, M. Ćosić, The Rainbow Ion-Solid Interaction Potential, to be published in Book of Proceeding, IAEA International Conference on Accelerators for Research and Sustainable Development: from good practices towards socioeconomic impact, May 23-27 2022, IAEA Headquarters Vienna, Austria.

64. N. Starčević, S.Petrović, Universal rainbow proton-crystal interaction potential, to be published in Book of Proceeding, 31st Summer School and International Symposium on the Physics of Ionized Gases, September 5-9, 2022, Belgrade, Serbia.

Биографија аутора

Кандидат Никола Старчевић је рођен 28. новембра 1984. године у Београду, Србија. Уписао је дипломске академске студије Физичког факултета Универзитета у Београду 2003. године, на коме је дипломирао 15. јуна 2010. године, смер Примењена физика и информатика. Мастер академске студије на Физичком факултету Универзитета у Београду је уписао школске 2010/2011. године, смер Примењена и компјутерска физика, а дипломирао у септембру 2011. године са просечном оценом 9.80. Тема његовог дипломског/мастер рада је била „Симулација реалних физичких процеса“. Докторске студије је уписао школске 2011/2012. године, на Физичком факултету Универзитета у Београду, смер Примењена и компјутерска физика.

Кандидат Никола Старчевић је запослен у Институту за нуклеарне науке „Винча“. У звање истраживача сарадника изабран је 6. јула 2017. године. Био је сарадник на истраживачком пројекту ИИИ45006: „Физика и хемија са јонским сноповима“ (рук. пројекта др Срђан Петровић). Тренутно је ангажован на истраживачкој теми: „Каналисање наелектрисаних честица у материјалима“ (рук. теме др Срђан Петровић).

У свом досадашњем истраживачком раду кандидат Никола Старчевић је био аутор два рада у истакнутом међународном часопису (категорије M22). Ова дисертација садржи резултате објављене у ова два рада, категорије M22, а у којима је кандидат био водећи аутор. Импакт фактори поменутих радова су 1.27 и 1.377, респективно. Кандидат је коаутор у једног поглавља у књизи (категорија M53).

Изјава о ауторству

Име и презиме аутора _____

Број индекса _____

Изјављујејм

Да је докторска дисертација под насловом

- Резултат споственог истраживачког рада;
- Да дисертације у целини ни у деловима није била предложена за стицање друге дипломе према студијским програмима других високосколских установа;
- Да су релутати коректно наведени и
- Да нисам кршио/ла ауторска права и користио/ла интелектуалну својину других лица.

Потпис аутора

У Београду, _____

Изјава о истоветности штампане и електронске верзије докторског рада

Име и презиме аутора _____

Број индекса _____

Студијски програм _____

Наслов рада _____

Ментор _____

Изјављујем да је штампана верзија мог докторског рада истоветна електронској верзији коју сам предао/ла ради похрањивања у **Дигиталном репозиторијуму Универзитета у Београду**.

Дозвољавам да се објаве моји лични подаци везани за добијање академског назива доктора наука, као што су име и презиме, година и место рођења и датум одбране рада.

Ови лични подаци могу се објавити на мрежним страницама дигиталне библиотеке, у електронском каталогу и у публикацијама Универзитета у Београду.

Потпис аутора

У Београду, _____

Изјава о коришћењу

Овлашћујем Универзитетску библиотеку „Светозар Марковић“ да у Дигитални репозиторијум Универзитета у Београду унесе моју докторску дисертацију под насловом:

Која је моје ауторско дело.

Дисертацију са свим прилозима предао/ла сам у електронском формату погодном за трајно архивирање.

Моју докторску дисертацију похрањену у Дигиталном репозиторијуму Универзитета у Београду и доступну у отвореном приступу могу да користе сви који поштују одредбе садржане у одабраном типу лиценце Креативне заједнице (Creative Commons) за коју сам се одлучио/ла.

1. Ауторство (ЦЦ БУ)
2. Ауторство – некомерцијално (ЦЦ БУ-НЦ)
3. Ауторство – некомерцијално – без прерада (ЦЦ-БУ-НЦ-НД)
4. Ауторство – некомерцијално – делити под истим условима (ЦЦ БУ-НЦ-СА)
5. Ауторство – без прерада (ЦЦ БУ-НД)
6. Ауторство – делити под истим условима (СС БУ-SA)

(Молимо заокружите само једну од шест понуђених лиценци.
Кратак опис лиценци је саставни део ове изјаве).

Потпис аутора

У Београду, _____

1. **Ауторство.** Дозвољаваате умножавање, дистрибуцију и јавно саопштавање дела и прераде, ако се наведе име аутора на начин одређен од стране аутора или даваоца лиценце, чак и у комерцијалне сврхе. Ово је најслободнија од свих лиценци.
2. **Ауторство – некомерцијално.** Дозвољаваате умножавање, дистрибуцију и јавно саопштавање дела и прераде, ако се наведе име аутора на начин одређен од стране аутора или даваоца лиценце. Ова лиценца не дозвољава комерцијалу употребу дела.
3. **Ауторство – некомерцијално – без прерада.** Дозвољаваате умножавање, дистрибуцију и јавно саопштавање дела, без промена, преобликовања или употребе дела у свом делу, ако се наведе име аутора на начин одређен од стране аутора или даваоца лиценце. Ова лиценца не дозвољава комерцијану употребу дале. У односу на све остале лиценце, овим лиценцом се ограничава највећи обим права коришћења дела.
4. **Ауторство – некомерцијално – делити под истим условима.** Дозвољаваате умножавање, дистрибуцију и јавно саопштавање дела и прераде, ако се наведе име аутора на начин одређен од стране аутора или даваоца лиценце и ако се прерада дистрибуира под истом или сличном лиценцом. Ова лиценца не дозвољава комерцијалну употребу дела и прерада.
5. **Ауторство – без прерада.** Дозвољаваате умножавање, дистрибуцију и јавно саопштавање дела, без промена, преобликовања или употребе дела у свом делу, ако се наведе име аутора на начин одређен од стране аутора или даваоца лиценце. Ова лиценца дозвољава комерцијалну употребу дела.
6. **Ауторство – делити под истим условима.** Дозвољаваате умножавање, дистрибуцију и јавно саопштавање дела и прераде, ако се наведе име аутора на начин одређен од стране аутора или даваоца лиценце и ако се прерада дистрибуира под истом или сличном лиценцом. Ова лиценца дозвољава комерцијалну употребу дела и прерада. Слична је софтверским лиценцама, односно лиценцама отвореног кода.