

РАДУЖНОЕ РАССЕЯНИЕ АТОМОВ ИНЕРТНЫХ ГАЗОВ НА ПОВЕРХНОСТИ КРИСТАЛЛОВ АЛЮМИНИЯ И СЕРЕБРА

П. Ю. Бабенко, Д. С. Мелузова, А. П. Солоницына, А. П. Шергин, А. Н. Зиновьев*

*Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе Российской академии наук
194021, Санкт-Петербург, Россия*

Поступила в редакцию 1 октября 2018 г.,
после переработки 1 октября 2018 г.
Принята к публикации 15 октября 2018 г.

Путем расчета траекторий движения частиц исследовались радужное рассеяние и ионная фокусировка атомов Ar на поверхности кристаллов Al(111) и Ag(111) и атомов Ne, Ar, Kr на поверхности кристалла Al(001). Полученные данные об особенностях в спектрах, связанных с радужным рассеянием, позволили определить амплитуду тепловых колебаний атомов для мишеней Al(111) и Ag(111). Полученные значения согласуются с данными независимых измерений. Из зависимости положения радужного пика от начальной энергии атомов были получены потенциалы взаимодействия атом–поверхность в диапазоне энергий 0.3–70 эВ для случая Ar–Ag и 3–45 эВ для остальных случаев. Величины и функциональные зависимости потенциалов от межъядерного расстояния сильно отличаются от хорошо известных моделей парных потенциалов. Причина различий, по нашему мнению, связана с взаимодействием налетающей частицы с электронами проводимости металла.

DOI: 10.1134/S0044451019040047

1. ВВЕДЕНИЕ

Если пучок атомов, падающих на монокристалл под скользящим углом к поверхности, ориентирован вдоль атомной цепочки, то имеют место поверхностное каналирование и эффект фокусировки (эффект сжатия углового распределения рассеянных частиц) [1]. Эти эффекты экспериментально исследовались многими авторами, наиболее детальное изучение проведено в работах [2–4]. Теоретическому описанию явления посвящены работы [5–8], в которых, в основном, использовалось приближение парных столкновений (ППС). Большое количество работ посвящено дифракции быстрых атомов на поверхности. Теоретическое описание дифракции рассматривается в работах [9, 10]. В статье [11] приведен случай, когда дифракция переходит в классическое рассеяние; в ней также рассматривается влияние неупругих соударений на угловую зависимость формы спектра.

В исследованных нами случаях диапазон значений рассматриваемых потенциалов взаимодействия может быть оценен на основании эксперименталь-

ных величин перпендикулярной составляющей энергии налетающих частиц. Этот диапазон лежит в интервале 0.3–70 эВ для случая Ar–Ag и 3–45 эВ для остальных случаев. Отметим, что при взаимодействии атомов инертных газов с металлом силы Ван дер Ваальса малы. Согласно работе [12], потенциальная яма, вызванная силами Ван дер Ваальса, меньше 0.06 эВ. В рассматриваемом диапазоне величин потенциалов взаимодействия преобладает отталкивательная компонента, характеризующая взаимодействие налетающей частицы с атомами решетки. Как правило, в этих случаях используют экранированные кулоновские потенциалы [13].

В нашем случае дифракцией можно пренебречь. Например, для легкого иона Ne и минимальной перпендикулярной составляющей энергии $E_{\perp} = 3$ эВ длина волны де Бройля составляет $0.037 \text{ \AA}$, и эта величина существенно меньше, чем расстояние между атомами в решетке (около $2 \text{ \AA}$). Таким образом, применимо квазиклассическое описание рассеяния частиц. В то же время мы рассматриваем случай поверхностного каналирования, когда перпендикулярная составляющая энергии налетающей частицы меньше порога проникновения частицы в твердое тело [6].

* E-mail: babenko@npd.ioffe.ru

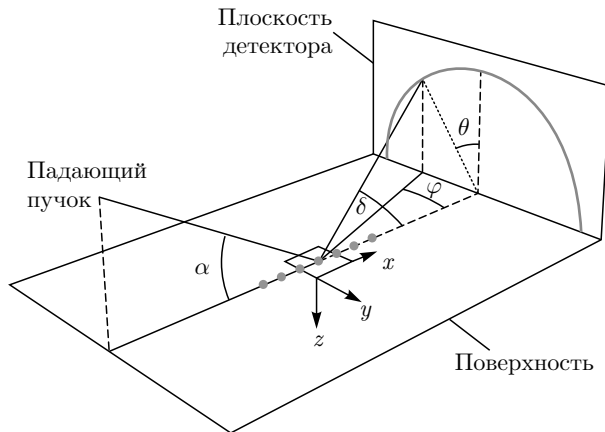


Рис. 1. Геометрия рассеяния

В работе [14] мы исследовали эффекты радужного рассеяния, используя ППС. Этот подход был предложен Робинсоном [15] и широко применяется при компьютерном моделировании. В приближении парных соударений последовательность столкновений на атомах цепочки рассматривается в предположении, что между столкновениями частицы двигаются по асимптотам траекторий. Применимость ППС зависит не только от величины полной энергии, но также от параметров траектории частицы между рассеивающими центрами. В исследуемых случаях поверхностей Al(111) и Ag(111) три атома образуют треугольник, внутри которого характер траектории меняется существенно из-за векторного сложения сил. Мы обнаружили, что в случае Ag–Ag(111) при энергиях меньше 10 кэВ описание экспериментальных данных с помощью приближения парных столкновений становится невозможным при любом виде используемого потенциала. Поэтому мы изменили подход и перешли к расчету траекторий частиц.

2. МОДЕЛИРОВАНИЕ РАССЕЯНИЯ ЧАСТИЦ ПРИ ПОВЕРХНОСТНОМ КАНАЛИРОВАНИИ

Геометрия описываемого эксперимента представлена на рис. 1. Траектории движения частицы в данной работе рассчитывались следующим образом. Пусть $\mathbf{r}_0$ и $\mathbf{v}$ — векторы, описывающие положение и скорость налетающей частицы, $\mathbf{r}_j$ — координаты частиц мишени, тогда уравнения движения можно записать в виде

$$\frac{d\mathbf{r}_0}{dt} = \mathbf{v}, \quad \frac{d\mathbf{v}}{dt} = \frac{1}{m} \sum_j F(|\mathbf{r}_0 - \mathbf{r}_j|) \frac{\mathbf{r}_0 - \mathbf{r}_j}{|\mathbf{r}_0 - \mathbf{r}_j|}, \quad (1)$$

где m — масса налетающей частицы. Предполагается, что сила F есть градиент двухчастичного потенциала и зависит только от расстояния между частицами $R = |\mathbf{r}_0 - \mathbf{r}_j|$. Второй множитель в сумме отражает разложение силы по координатным осям. Суммирование ведется по всем учитываемым атомам кристалла. В наших расчетах мы принимали во внимание атомы двух верхних слоев, расположенных на расстояниях, меньших $3d$ от рассматриваемой точки траектории частицы (всего учитывалось 79 атомов), d — постоянная решетки. Кристаллическая решетка задавалась с учетом исследуемой плоскости для заданного материала мишени. Направление $\mathbf{x}$ выбирается вдоль одной из кристаллографических осей. Падающий пучок лежит в плоскости xz . При пролете расстояния d вдоль оси x проводилась трансляция решетки.

Тепловое движение атомов решетки учитывалось следующим образом. В нашем случае время столкновения налетающей частицы с энергией в диапазоне килоэлектронвольт на много порядков меньше, чем период тепловых колебаний атомов мишени. Таким образом, мы можем предположить, что положения атомов «заморожены» и характеризуются координатами, имеющими гауссово распределение. К фиксированному положению атомов кристалла в решетке добавлялось смещение, вызванное тепловыми колебаниями, которое задавалось случайным образом в предположении распределения Гаусса. Колебания атомов решетки считались некоррелированными. Амплитуда колебаний задавалась величиной σ . В ряде случаев мы варьировали независимо амплитуду колебаний вдоль и перпендикулярно поверхности. Полученные координаты атомов фиксировались на время пролета расстояния d , а при трансляции решетки смещения атомов решетки вновь задавались случайным образом.

Заменой переменных $\mathbf{p} = \mathbf{v}/v_0$ и $u = v_0 t$ уравнения преобразовывались к более удобному для вычислений виду:

$$\frac{d\mathbf{r}_0}{du} = \mathbf{p}, \quad \frac{d\mathbf{p}}{du} = \frac{1}{2E_0} \sum_j F(|\mathbf{r}_0 - \mathbf{r}_j|) \frac{\mathbf{r}_0 - \mathbf{r}_j}{|\mathbf{r}_0 - \mathbf{r}_j|}, \quad (2)$$

где $E_0 = mv_0^2/2$ — начальная энергия налетающего со скоростью v_0 атома. Углы вылета частицы, φ и δ (см. рис. 1), рассчитывались по формулам

$$\varphi = \arctg \frac{p_y(\infty)}{p_x(\infty)}, \quad (3)$$

$$\delta = \arcsin \sqrt{\frac{p_y(\infty)^2 + p_z(\infty)^2}{p_x(\infty)^2 + p_y(\infty)^2 + p_z(\infty)^2}},$$

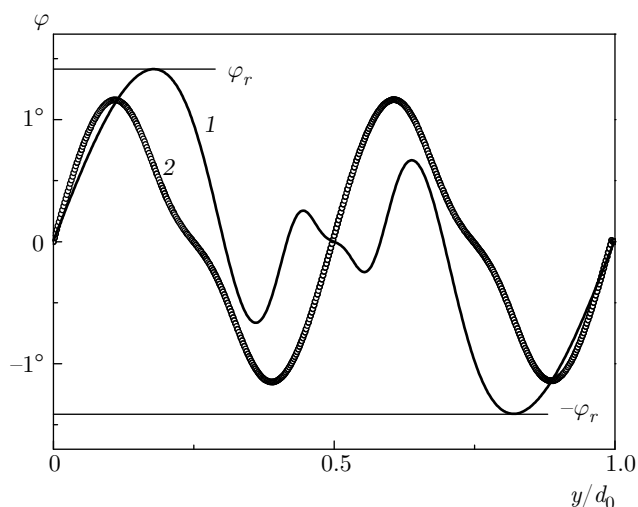


Рис. 2. Азимутальный угол рассеяния φ в зависимости от прицельного параметра y для систем Ag-Al(111) (кривая 1) и Ag-Al(001) (кривая 2). Здесь d_0 — расстояние между атомными цепочками. Углы радужного рассеяния обозначены $\pm\varphi_r$

где $p_x(\infty)$, $p_y(\infty)$, $p_z(\infty)$ — составляющие вектора приведенной скорости в конце траектории. Начальные и конечные координаты траектории, а также шаг интегрирования выбирались из условия, чтобы погрешность вычисления углов была менее 10^{-4} градуса. При вычислении спектров проводилось сканирование пучком по координатам x и y в диапазоне $\pm d$. Чтобы проверить точность расчетов, мы проводили сканирование для интервала $\pm 2d$ и не наблюдали разницы в получаемых результатах. Начальные и конечные данные записывались в массив, а затем проводилась обработка данных и вычислялись угловые распределения с заданной точностью. Для обеспечения достаточной статистики обычно учитывалось до 10^6 траекторий.

3. РАДУЖНОЕ РАССЕЯНИЕ ПРИ ПОВЕРХНОСТНОМ КАНАЛИРОВАНИИ

Зависимость угла рассеяния φ от прицельного параметра вдоль оси y имеет максимумы и минимумы. На рис. 2 представлены данные нашего расчета для случаев Ag-Al(111) и Ag-Al(001). При значении азимутального угла, равного $\pm\varphi_r$, производная $d\varphi/dy = 0$, а спектр частиц $dN/d\varphi \sim dy/d\varphi$ будет иметь резкий максимум. Пространственное смещение рассеивающего центра из-за тепловых колебаний вызывает изменение угла рассеяния частицы, что приводит к уширению пика радужного рассея-

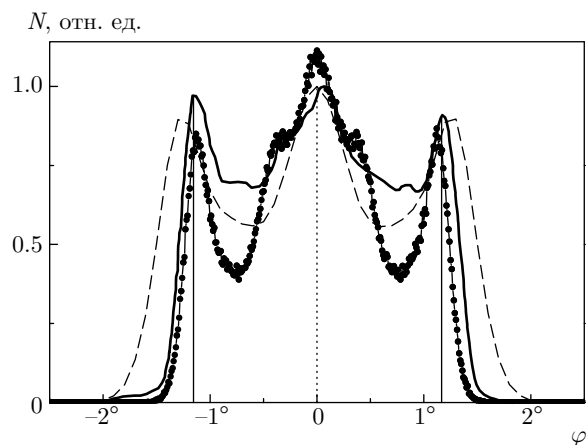


Рис. 3. Распределения рассеянных атомов Ag в зависимости от азимутального угла φ , рассчитанные методом траекторий (кривая с точками) и в ППС (штриховая кривая), и их сравнение с экспериментом [2] (сплошная кривая)

ния. Влияние неупругости соударения в нашем случае мало, и им можно пренебречь из-за малости угла рассеяния. Согласно работе [11], величина неупругой потери энергии пропорциональна δ^3 . В нашем случае $\delta < 3^\circ$. Следовательно, уширение пика вызвано в основном тепловым движением атомов мишени.

Как видно на рис. 2, для ориентации Al(111) возникают дополнительные пики вследствие влияния второго слоя атомов.

В спектре рассеянных частиц для системы Ag-Al в зависимости от угла φ наблюдается структура из трех пиков (рис. 3). Появление боковых пиков связано с проявлением радужного рассеяния в поверхностном полуканале. Центральный пик обусловлен фокусировкой траекторий вблизи оси канала. Как видно на рис. 3, наш расчет удовлетворительно описывает экспериментальные данные из работы [2]. На рисунке приведен также результат расчета углового распределения рассеянных частиц, выполненного в приближении парных соударений. В обоих случаях использовался один и тот же потенциал [16]. Как видно из сравнения, расчет траекторий позволяет лучше описать положение радужных пиков, наблюдаемое в эксперименте.

4. АМПЛИТУДА ТЕПЛОВЫХ КОЛЕБАНИЙ

Как упоминалось ранее, уширение радужного пика вызвано в основном тепловыми колебаниями. При нулевой температуре форма пика радужного рассеяния описывается функцией Эйри. Дополни-

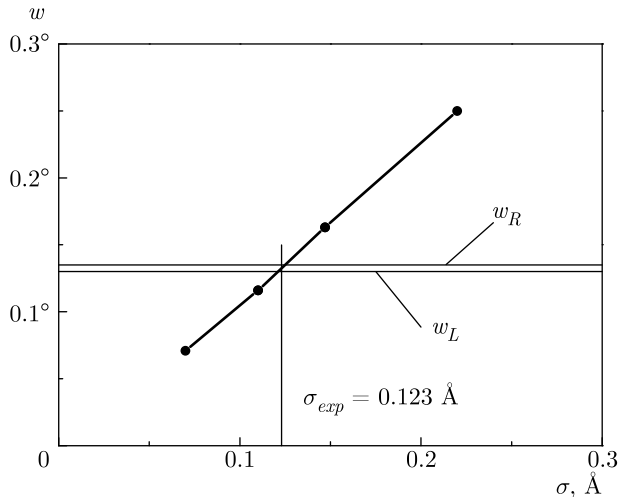


Рис. 4. Уширение пика радужного рассеяния w в зависимости от амплитуды тепловых колебаний σ при моделировании. Горизонтальными линиями показаны значения w , полученные аппроксимацией гауссовой функции левого и правого крыльев радужных пиков, наблюдаемых на эксперименте. Вертикальная линия дает значение амплитуды тепловых колебаний $\sigma = 0.123 \pm 0.002 \text{ \AA}$

тельный вклад в уширение радужного пика вносят аппаратная функция детектора (угловое разрешение детектора примерно 0.03°) и угловая расходимость пучка 10^{-4} рад. В рассматриваемых случаях уширение пика полностью определяется тепловыми колебаниями атомов решетки и его ширина не превышает 0.12° .

Левое и правое крылья экспериментального спектра хорошо описываются распределением Гаусса

$$N = A \exp \left[-\frac{(\varphi - \varphi_c)^2}{2w^2} \right]$$

с параметрами φ_c и w . Анализируя экспериментальные спектры, можно получить величины w для обоих крыльев. При моделировании мы варьировали значения амплитуды σ тепловых колебаний и, обрабатывая расчетные спектры, получили калибровочную зависимость $w(\sigma)$ (рис. 4). Сравнение результатов вычислений с экспериментальными данными [2–4] дает амплитуды тепловых колебаний для случая Ar–Al ($\sigma = 0.123 \pm 0.007 \text{ \AA}$) и для случая Ar–Ag ($\sigma = 0.120 \pm 0.013 \text{ \AA}$). Сравнение значений для левого и правого крыльев, а также данных измерений при различных энергиях, позволяет оценить методическую ошибку. Другая проверка точности может быть осуществлена сравнением величин σ , полученных для различных энергий соударения. В пределах экспериментальной ошибки полученные амплитуды

колебаний не зависят от энергии налетающей частицы, что подтверждает отсутствие вклада неупругих потерь энергии при столкновениях в уширение радужного пика.

Полученные данные удовлетворительно согласуются с результатами независимых измерений: $\sigma = 0.110 \pm 0.006$ для Al(110) [17] и $\sigma = 0.130 \pm 0.010 \text{ \AA}$ [18] для Ag(110). Так как амплитуды тепловых колебаний могут зависеть от ориентации поверхности, это сравнение носит качественный характер.

5. ПОЛУЧЕНИЕ ИНФОРМАЦИИ О ПОТЕНЦИАЛЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ НАЛЕТАЮЩАЯ ЧАСТИЦА–ПОВЕРХНОСТЬ

В работе [3] отмечалась сильная зависимость положения угла φ_r от начальной энергии атомов и предлагалось использовать эту информацию для получения сведений о потенциале. В работе [16] нами были получены предварительные данные для случая Ar–Ag(111).

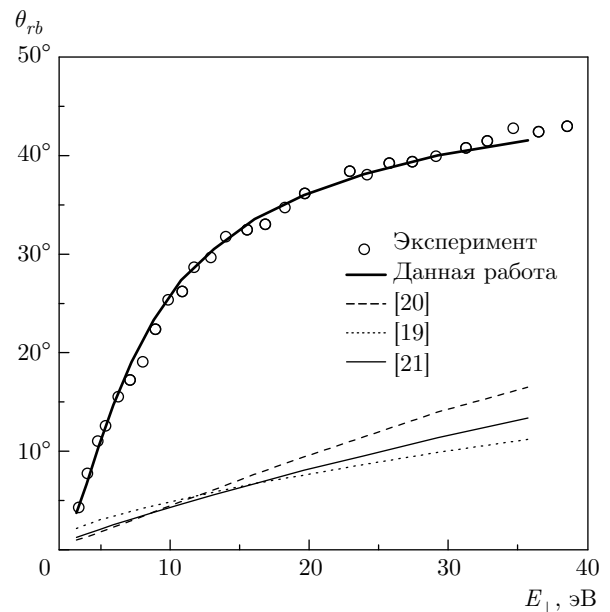
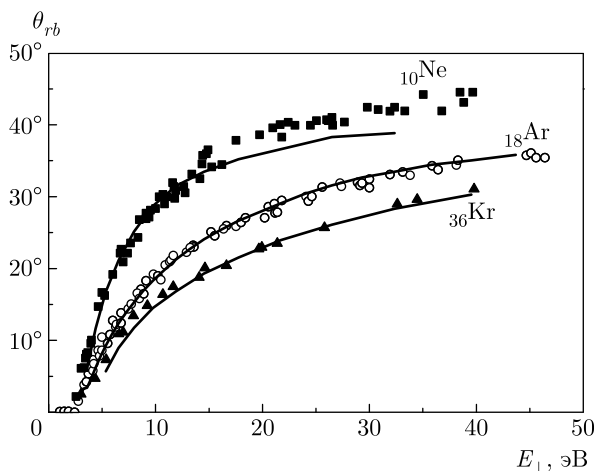


Рис. 5. Положение пика радужного рассеяния в зависимости от нормальной составляющей начальной энергии $E_\perp = E_0 \sin^2 \alpha$ для случая Ar–Al(111). Экспериментальные данные (точки) взяты из работы [2]. Жирной сплошной линией показаны результаты наших вычислений, полученные с использованием параметров потенциалов, приведенных в табл. 1. Для сравнения приведены результаты вычислений, выполненных с использованием потенциалов Мольера [19], ZBL [20] и Зиновьева [21]. Углы θ_{rb} и φ_r связаны соотношением $\sin \theta_{rb} = \tan \varphi_r \tan \delta$

Таблица 1. Параметры потенциалов, полученные для различных систем путем анализа данных о радужном рассеянии. Используются атомные единицы

Параметры	Система				
	Ne–Al(001)	Ar–Al(001)	Kr–Al(001)	Ar–Al(111)	Ar–Ag(111)
A	15.57 ± 0.16	65.83 ± 0.69	192.1 ± 1.5	26.31 ± 0.32	77.45 ± 0.42
B	1.560 ± 0.007	1.559 ± 0.005	1.689 ± 0.003	1.449 ± 0.007	1.544 ± 0.003

**Рис. 6.** Положение пика радужного рассеяния в зависимости от $E_{\perp} = E_0 \sin^2 \alpha$ для столкновений атомов Ne, Ar и Kr с поверхностью Al(001). Кривыми показаны результаты наших вычислений, полученные с использованием параметров потенциалов, приведенных в табл. 1. Экспериментальные данные (символы) взяты из работы [2]

На рис. 5 показаны зависимости, полученные нами с использованием потенциалов Мольера [19], ZBL [20] и Зиновьева [21], которые существенно отличаются от экспериментальных данных. Для того чтобы описать экспериментальную зависимость $\varphi_r(E)$, мы вычисляли положения радужного пика при различных начальных энергиях, используя следующую форму потенциалов:

$$U(R) = -\frac{Ae^{-BR}}{R}. \quad (4)$$

Здесь все величины выражены в атомных единицах. Параметры A и B варьировались. В итоге удалось получить хорошее согласие с экспериментальными данными (сплошные кривые на рис. 5, 6). Значения параметров потенциала, при которых достигается наилучшее согласие с экспериментом, приведены в табл. 1. Полная ошибка при получении потенциала взаимодействия вследствие ошибок измерений и ме-

тодологической ошибки оценивается в 15 %.

Рисунки 7 представляют прямое сравнение величин полученного нами потенциала $U(R)$ с величинами потенциалов для моделей работ [20, 21], а также с более точным расчетом из работы [12] с применением приближения функционала плотности. В работе [12] использовался компьютерный код Dmol [22] для выбора базиса волновых функций. Рисунки 7 показывают, что полученные нами для наилучшего описания экспериментальных данных значения потенциала гораздо меньше величин, предсказываемых теорией. Это различие превышает возможные ошибки во всем изученном диапазоне R . При $R < 2.5$ ат. ед. все теоретические модели дают одинаковые величины. Для $R > 2.5$ ат. ед. вычисления работы [12] являются, на наш взгляд, наиболее точными. Наша оценка точности этих расчетов составляет примерно 1.5 эВ.

Полный потенциал взаимодействия между налетающей частицей и поверхностью металла может быть представлен в виде суммы вкладов от взаимодействия налетающей частицы с атомами решетки и электронами металла. Определим вклад потенциала U_{ae} , связанного с взаимодействием налетающей частицы с электронами металла, как разность между теоретическим U_{ZN} [12] и экспериментальным U_{exp} значениями потенциала, т. е. $U_{ae} = U_{ZN} - U_{exp}$. Полученные величины U_{ae} приведены на рис. 8. Величины U_{ae} зависят от ориентации поверхности (см. различие случаев Ar–Al(111) и Ar–Al(001)) и от типа взаимодействующих частиц. Для случая Kr–Al(001) эффект от взаимодействия с электронами пренебрежимо мал, в то время как для случая Ne–Al(001) он вносит существенный вклад. Это различие может быть объяснено доминирующим вкладом взаимодействия иона с решеткой в случае тяжелой налетающей частицы.

На рис. 8 видно, что U_{ae} — это притягивательная часть потенциала, которая компенсирует отталкивательное взаимодействие между налетающей час-

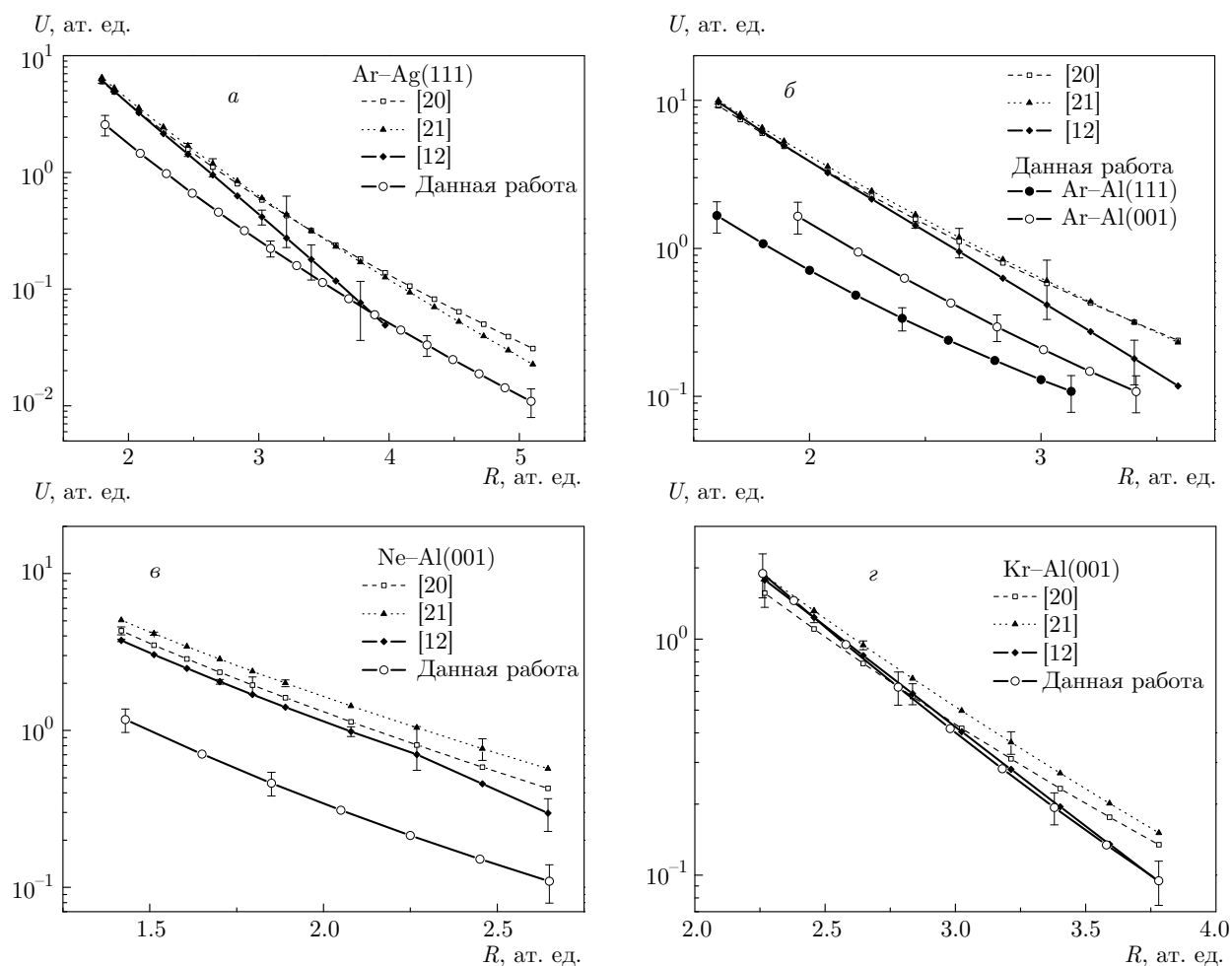


Рис. 7. Потенциалы взаимодействия атом–поверхность в зависимости от межатомного расстояния: *а* — Ar–Ag(111); *б* — Ar–Al(111) и Ar–Al(001); *в* — Ne–Al(001); *г* — Kr–Al(001). Сплошные линии с кружками представляют потенциал, полученный нами при подгонке расчетных спектров к экспериментальным. Другими линиями показаны результаты расчетов для потенциалов Зиновьева – Нордлунда [12], ZBL [20] и Зиновьева [21]

тей и атомами решетки. В работах [23, 24] было предложено описывать взаимодействие атома с поверхностью металла при помощи степенной зависимости от межатомного расстояния. На рис. 8 величины U_{ae} представлены в двойном логарифмическом масштабе. В таком масштабе степенная зависимость выглядит как прямая линия. Однако кривые на рис. 8 не подтверждают степенную зависимость. Это не удивительно, так как результаты работ [23, 24] были получены для случая взаимодействия атома с поверхностью при тепловых энергиях. В настоящей работе мы рассматривали диапазон гораздо больших значений нормальной составляющей энергии налетающих частиц ($E_{\perp} = 0.3\text{--}70$ эВ для случая Ar–Ag и 3–45 эВ в остальных случаях).

Полученные значения U_{ae} могут быть аппроксимированы с помощью формулы (4), но с противополо-

жным знаком. Параметры аппроксимации зависимости U_{ae} приведены в табл. 2.

Поле налетающей частицы поляризует электроны металла. В первом приближении мы можем предположить, что в металле возникает индуцированный заряд противоположного знака. Его пространственное распределение похоже на распределение заряда налетающей частицы. Будем рассматривать границу кристалла как положение верхнего слоя ионов кристаллической решетки. Если мы зафиксируем положение «металлического зеркала» на расстоянии z_0 от границы кристалла и предположим, что налетающая частица находится на расстоянии z (см. вставку на рис. 9), то мы можем представить потенциал взаимодействия между налетающей частицей и электронами металла в виде

Таблица 2. Параметры аналитической зависимости величины вклада U_{ae} в потенциал взаимодействия атом–поверхность. Используются атомные единицы

Параметры	Система			
	Ne–Al(001)	Ar–Al(001)	Ar–Al(111)	Ar–Ag(111)
A	28.6 ± 1.4	180 ± 16	252 ± 5	264 ± 36
B	1.45 ± 0.03	1.82 ± 0.04	1.85 ± 0.01	2.06 ± 0.06

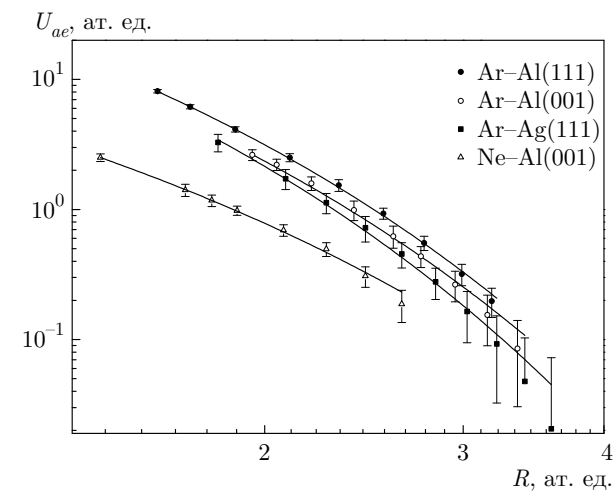


Рис. 8. Вклады взаимодействия налетающая частица–электроны металла в потенциал взаимодействия в зависимости от межъядерного расстояния

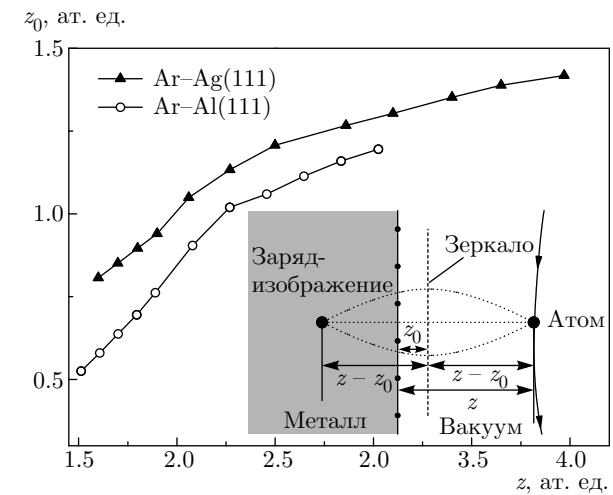


Рис. 9. Положение z_0 «зеркала» в зависимости от расстояния z между налетающей частицей и границей кристалла

$$U_{ae} = -U[2(z - z_0)],$$

где U — потенциал взаимодействия между налетающей частицей и наведенным зарядом, z — расстоя-

ние до поверхности при максимальном приближении атома к поверхности. Например, если на поверхность падает атом Ar, то U_{ae} — это потенциал взаимодействия двух атомов аргона с противоположными знаками, находящихся на расстоянии $R = 2(z - z_0)$ друг от друга.

В этом случае можно оценить положение металлического зеркала при различных условиях, используя приведенную выше формулу для U_{ae} . На рис. 9 показано положение зеркала для различных систем налетающая частица–металл. Отметим, что для всех приведенных случаев положение z_0 зеркала находится со стороны вакуума. Когда частица-снаряд приближается к поверхности металла, зеркало становится ближе к границе кристаллической решетки. Различие в положениях зеркала для случаев Ar–Al и Ar–Ag согласуется с различием радиусов электронного облака для Al и Ag. Согласно [25], соответствующие радиусы электронной волновой функции (радиусы сферы, содержащей один электрон) составляют $r_s(\text{Al}) = 2.07$ ат. ед. и $r_s(\text{Ag}) = 3.02$ ат. ед. Если рассматривать плоскость кристалла (001), то влияние взаимодействия с электронами слабее и зеркало находится ближе к поверхности.

6. ВЫВОДЫ

1. Установлено, что траекторные расчеты рассеяния частиц в случае поверхностного каналирования позволяют достаточно точно описать угловые зависимости выхода рассеянных частиц и эффект радужного рассеяния.
2. Показано, что анализ крыльев угловых зависимостей при радужном рассеянии позволяет довольно точно оценить величины амплитуд тепловых колебаний поверхностных атомов.
3. Показано, что зависимость углового распределения при радужном рассеянии от энергии столкновения не может быть описана известными моделями двухатомных потенциалов. Из эксперименталь-

ных зависимостей положения радужного пика от энергии соударения получены параметры потенциала взаимодействия налетающего атома с поверхностью для систем Ar–Al(111), Ar–Ag(111), Ne, Ar, Kr–Al(001).

4. Выявленное различие между потенциалом, полученным из измерений, и стандартными двухатомными потенциалами объяснено взаимодействием налетающего атома с электронами металла.

ЛИТЕРАТУРА

1. Е. С. Машкова, В. А. Молчанов, *Рассеяние ионов средних энергий поверхностями твердых тел*, Атомиздат, Москва (1980), с. 174.
2. P. Tiwald, A. Scholler, H. Winter et al., Phys. Rev. B **82**, 125453 (2010).
3. A. Schuller, S. Wethekam, A. Mertens et al., Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B **230**, 172 (2005).
4. A. Schuller and H. Winter, Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B **261**, 578 (2007).
5. D. M. Danailov, R. Pfandzelter, T. Igel et al., Appl. Surf. Sci. **171**, 113 (2001).
6. D. Danailov, K. Gärtner, and A. Caro, Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B **153**, 191 (1999).
7. D. Danailov, J.-H. Rechten, and K. J. Snowdon, Surf. Sci. **259**, 359 (1991).
8. D. Danailov, D. J. O'Connor, and K. J. Snowdon, Surf. Sci. **347**, 215 (1996).
9. A. Zugarramurdi and A. G. Borisov, Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B **317**, 83 (2013).
10. A. Zugarramurdi and A. G. Borisov, Phys. Rev. A **86**, 062903 (2012).
11. P. Roncin and M. Debiossac, Phys. Rev. B **96**, 035415 (2017).
12. A. N. Zinoviev and K. Nordlund, Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B **406**, 511 (2017).
13. W. Eckstein, *Computer Simulation of Ion–Solid Interactions*, Springer, Berlin (1991), p. 104.
14. П. Ю. Бабенко, А. Н. Зиновьев, А. П. Шергин, Письма в ЖЭТФ **101**, 940 (2015).
15. M. T. Robinson and I. M. Torrens, Phys. Rev. B **9**, 5008 (1974).
16. P. Yu. Babenko, D. S. Meluzova, A. P. Shergin et al., Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B **406**, 460 (2017).
17. H. Gobel and P. von Blanckenhagen, Phys. Rev. B **47**, 2378 (1993).
18. S. Narasimhan, Phys. Rev. B **64**, 125409 (2001).
19. G. Moliere, Z. Naturforsch. A **2**, 133 (1947).
20. J. F. Ziegler, J. P. Biersack, and U. Littmark, *The Stopping and Range of Ions in Solids, The Stopping and Range of Ions in Matter*, Vol. 1, Pergamon, New York (1985).
21. A. N. Zinoviev, Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B **269**, 829 (2011).
22. K. Nordlund, N. Runeberg, and D. Sundholm, Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B **132**, 45 (1997).
23. E. Zaremba and W. Kohn, Phys. Rev. B **13**, 2270 (1976).
24. H. Hoinkes, Rev. Mod. Phys. **52**, 933 (1980).
25. C. Kittel, *Introduction to Solid State Physics*, John Wiley and Sons, New York (1976), p. 599.