

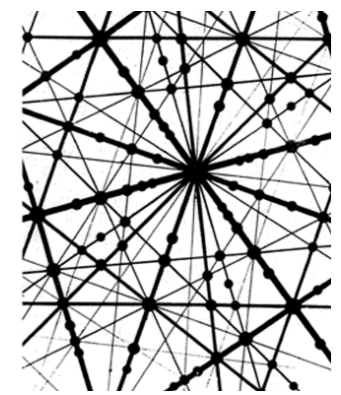
Влияние электронной подсистемы на экранировку потенциала при рассеянии ионов в металлах

52-я Международная Тулиновская конференция по Физике Взаимодействия Заряженных Частиц с Кристаллами



П.Ю. Бабенко, В.С. Михайлов, А.Н. Зиновьев
ФТИ им. А.Ф. Иоффе, Санкт-Петербург, Россия
e-mail: babenko@npd.ioffe.ru

Москва, МГУ им М.В. Ломоносова,
30 мая – 01 июня 2023



Аннотация

Предложены приближенные формулы потенциалов для протонов и атомов водорода в металле и показано, что учет эффектов экранирования заряда налетающей частицы позволяет объяснить различие потенциалов межатомного взаимодействия, полученных в рамках теории функционала плотности для газовой фазы и потенциалов, полученных авторами при обработке экспериментальных данных о рассеянии атомных частиц от поверхности твердого тела. Установлено влияние экранировки в потенциале на угловые распределения атомных частиц после прохождения тонких пленок вещества и на ядерные тормозные способности.

Потенциал взаимодействия в приближении функционала плотности рассчитывается как разность энергии системы атомов при расстоянии R и $R=\infty$. Если мы не будем учитывать возмущение электронной плотности системы, то члены с кинетической энергией электронов исчезают и потенциал может быть записан в виде:

$$U(R) = \frac{Z_1 Z_2}{R} - Z_1 N_2 \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \rho(r) \frac{1}{|\vec{R} - \vec{r}|} r^2 dr \cdot \sin\theta d\theta d\varphi \quad (+)$$

где первый член - описывает кулоновское взаимодействие ядер, а второй член - энергию взаимодействия между зарядом Z_1 и электронами второй частицы, N_2 - число электронов иона решетки. Запишем распределение заряда $\rho(r)$ в виде:

$$\rho(r) = \frac{N_2}{4\pi a^2 r} \sum_{i=1}^3 A_i B_i^2 \exp\left(-B_i \frac{r}{a}\right) \quad A = \begin{pmatrix} 0.1 \\ 0.55 \\ 0.35 \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} 6 \\ 1.2 \\ 0.3 \end{pmatrix}$$

A_i и B_i - коэффициенты разложения в потенциале Мольера

Подставляя $\rho(r)$, записывая $|\vec{R} - \vec{r}| = \sqrt{R^2 + r^2 - 2Rr\cos\theta}$

и интегрируя по θ и φ , имеем:

$$U(R) = \frac{Z_1 Z_2}{R} - \frac{Z_1 N_2}{2R a^2} \sum_{i=1}^3 A_i B_i^2 \int_0^\infty dr \exp\left(-B_i \frac{r}{a}\right) (R + r - |R - r|)$$

Разбивая интеграл на две части $r < R$ и $r > R$, получаем формулу, которая описывает взаимодействие иона с зарядом Z_1 с ионом ($N_2 < Z_2$) или атомом решетки ($N_2 = Z_2$).

Газовая фаза

$$U(R) = \frac{Z_1(Z_2 - N_2)}{R} + \frac{Z_1 N_2}{R} \sum_{i=1}^3 A_i \exp\left(-B_i \frac{R}{a}\right) \quad (1)$$

В случае взаимодействия иона в твердом теле кулоновский заряд иона экранирован электронами проводимости и потенциал иона может быть записан в виде:

$$U_1(R) = \frac{Z_1}{R} \exp\left(-\frac{R}{R_D}\right)$$

где R_D - длина экранирования Дебая. Для золота $R_D = 1.358$ а.е.

Заменяя в формуле (+) кулоновский потенциал на потенциал экранированного кулоновского заряда и проводя интегрирование, получаем потенциал взаимодействия иона, экранированного электронами проводимости, с решеткой металла:

Протон – твердое тело

$$U(R) = \frac{Z_1(Z_2 - N_2)}{R} \exp\left(-\frac{R}{R_D}\right) + \frac{Z_1 N_2}{R} \sum_{i=1}^3 A_i \exp\left(-B_i \frac{R}{a}\right) \exp\left(-\frac{R}{R_D}\right) \quad (2)$$

В случае атома водорода заряд ядра протона экранируется связанным электроном. В книге Ландау для потенциала атома водорода из решения уравнения Пуассона получено выражение:

$$U_2(R) = \left(\frac{1}{R} + \frac{1}{a_B}\right) \exp\left(-\frac{2R}{a_B}\right)$$

$a_B = 1$ а.е. – радиус Бора

Заменяя в формуле (+) член Z_1/R во втором слагаемом на $U_2(R)$ и учитывая, что $Z_2 = N_2$, получаем выражение для потенциала взаимодействия нейтрального атома с решеткой твердого тела:

Атом водорода – твердое тело

$$U(R) = \frac{Z_1 Z_2}{R} \sum_{i=1}^3 A_i \exp\left(-B_i \frac{R}{a}\right) \exp\left(-\frac{2R}{a_B}\right) \left(1 + \frac{R}{a_B}\right) \quad (3)$$

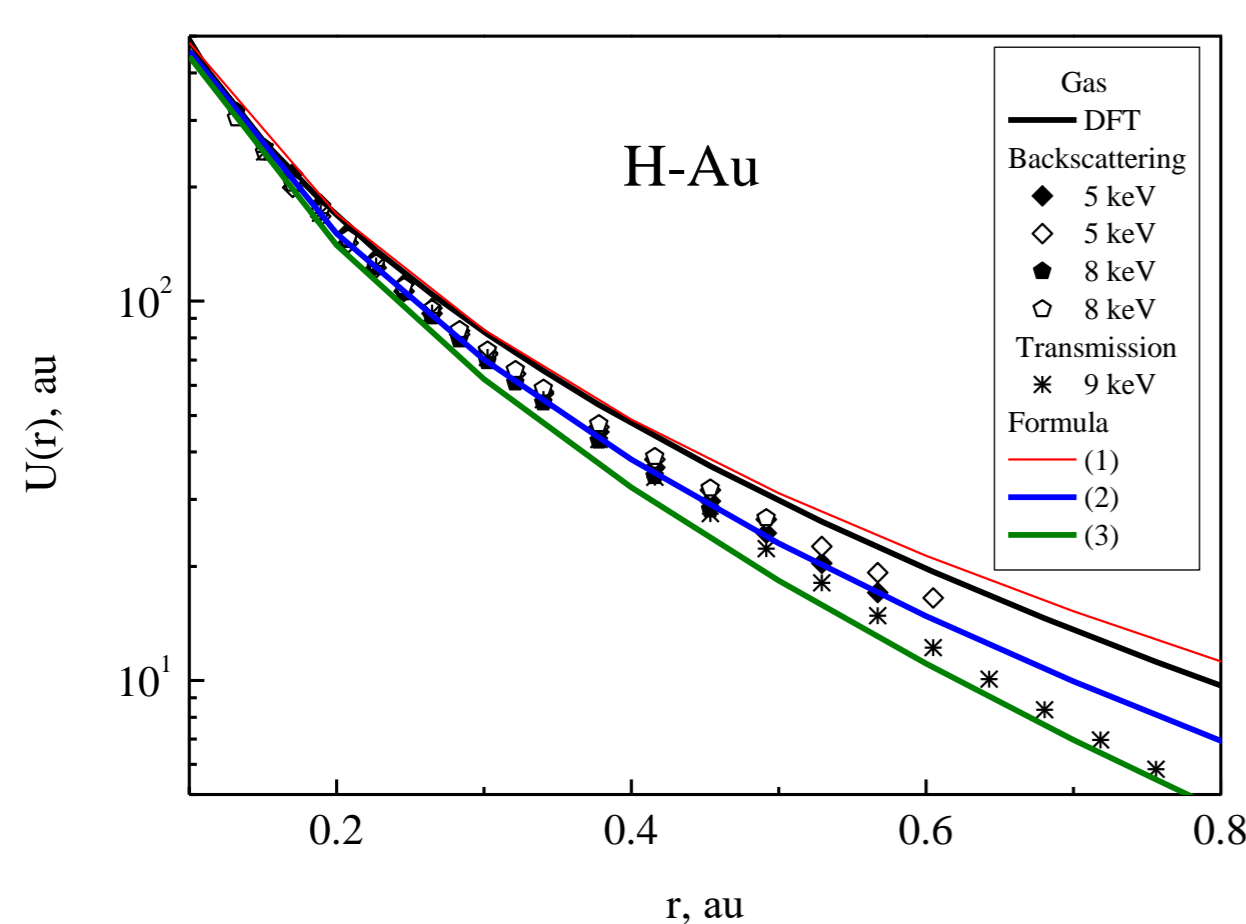


Рис. 1. Потенциал межатомного взаимодействия в зависимости от расстояния. Система H-Au. Приведен потенциал DFT для газовой фазы. Точками показаны данные из работ [1,2], в которых значения потенциалов получены обработкой экспериментальных данных о рассеянии частиц на поверхности или прохождения через тонкие пленки. Линии с точками расчет по формулам (1,2,3).

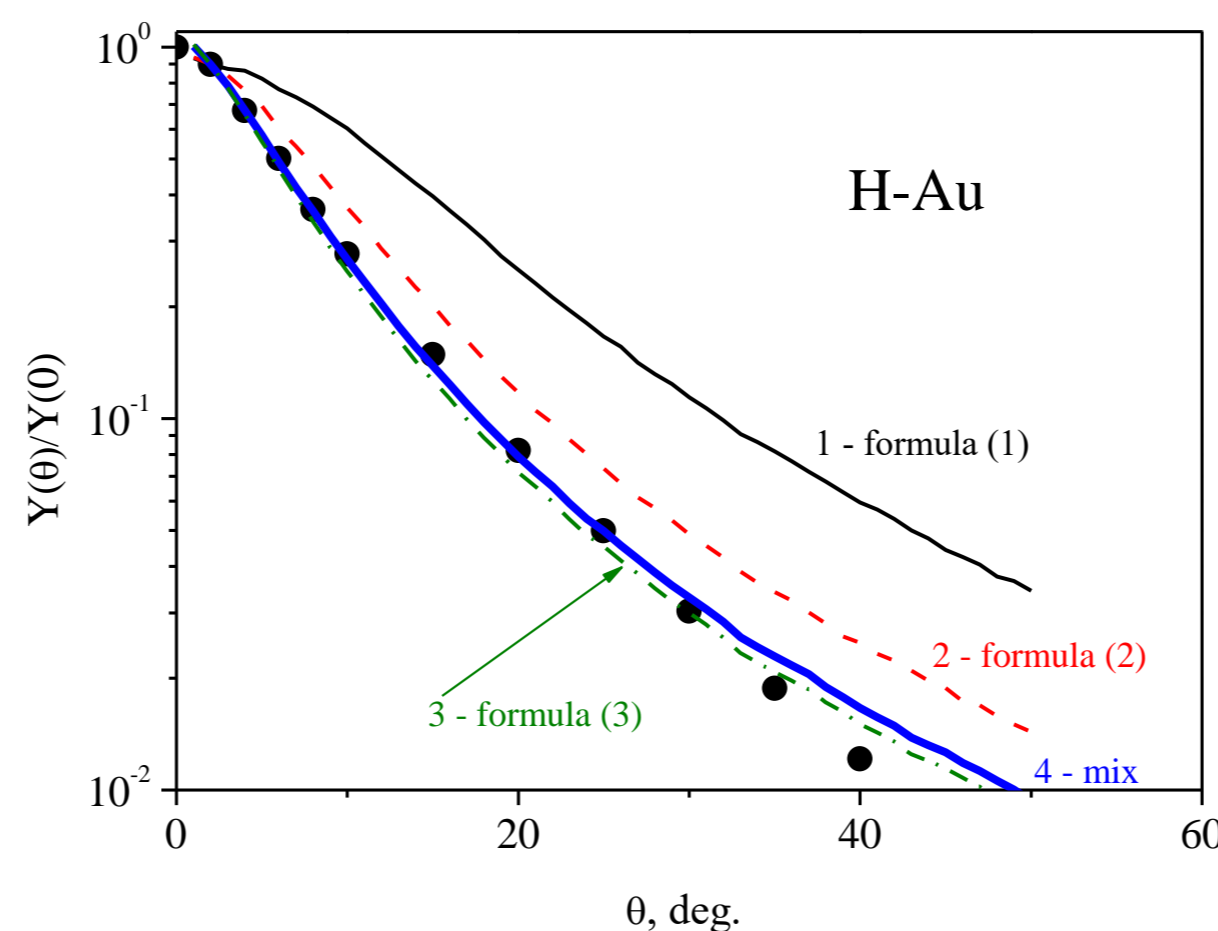


Рис. 2. Угловое распределение частиц, прошедших тонкую пленку золота. Точки - эксперимент [3]. Линии - наш расчет для потенциалов (1,2,3). Жирная линия - расчет для композитного пучка с содержанием нейтральных атомов 87.5%.

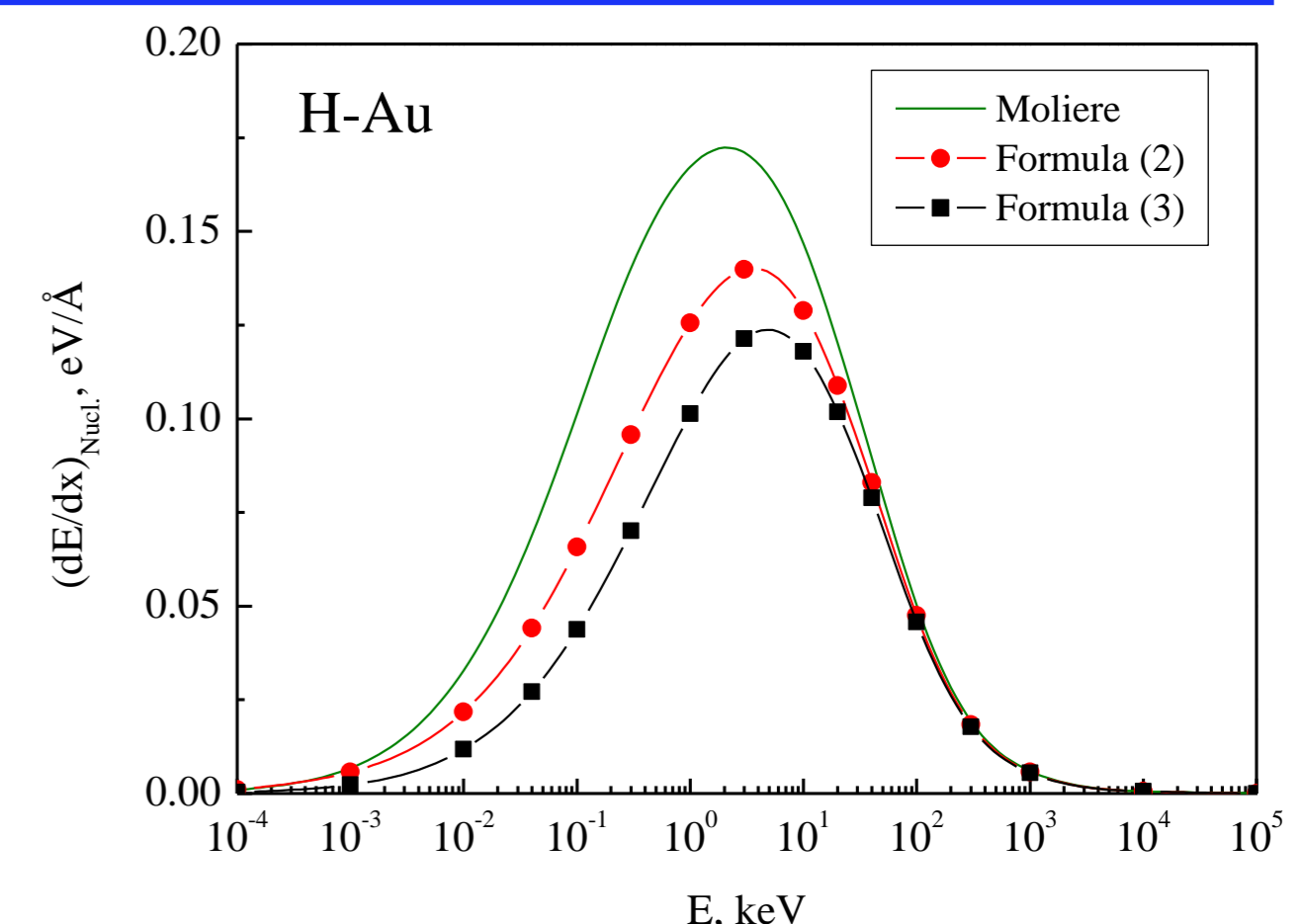


Рис. 3. Ядерные тормозные способности в зависимости от энергии бомбардирующих частиц. Рассматривается система H-Au. Расчет производился для потенциала Мольера и потенциалов, посчитанных по формуле (2) для протона в металле и формуле (3) для атома водорода.

Выводы

Показано, что учет эффектов экранирования заряда налетающей частицы позволяет объяснить различие потенциалов межатомного взаимодействия, полученных в рамках теории функционала плотности для газовой фазы и потенциалов, полученных авторами при обработке экспериментальных данных о рассеянии атомных частиц от поверхности твердого тела.

Продемонстрировано влияние экранировки в потенциале на угловые распределения атомных частиц после прохождения тонких пленок вещества и на результаты расчетов ядерных тормозных способностей при торможении частиц в материалах.