

Потенциал взаимодействия протонов и атомов водорода с металлами

П. Ю. Бабенко¹⁾, В. С. Михайлов, А. Н. Зиновьев

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе РАН, 194021 С.-Петербург, Россия

Поступила в редакцию 24 марта 2023 г.

После переработки 24 марта 2023 г.

Принята к публикации 20 апреля 2023 г.

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.

DOI: 10.31857/S1234567823100026, EDN: cknvprq

Хорошо известно, что при движении ионов в металле поляризация среды приводит к экранированию потенциала иона. В случае иона, движущегося с некоторой скоростью в среде, отклик электронной подсистемы происходит с запаздыванием в пространстве и во времени, что приводит к возникновению кильватерного потенциала. Нойфелд и Ричи [1] развили теорию кильватерного взаимодействия, которая нашла экспериментальное подтверждение. Обзор работ по динамическому экранированию ионов при движении в твердом теле дан в статье [2]. Экранирование и кильватерный эффект хорошо описываются возбуждением плазмонов [3].

Нас будет интересовать случай столкновений со скоростями $v < 1$ а.е., т.е. статическая экранировка. В обзоре Дедкова [4] получены общие выражения для короткодействующей части экранированного потенциала (с учетом собственных электронов). Из современных работ можно отметить работы по расчету многочастичных потенциалов [5–8] для описания эксперимента методами молекулярной динамики. В работе [9] рассматривалась модель взаимодействия заряженных частиц в неидеальной квазиклассической плазме.

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:

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

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 $\rho(r)$ в виде [4]:

$$\rho(r) = \frac{N_2}{4\pi a^2 r} \sum_{i=1}^3 A_i B_i^2 \exp\left(-B_i \frac{r}{a}\right), \quad (2)$$

где A_i и B_i – коэффициенты разложения в потенциале Мольера [10]:

$$A = \begin{pmatrix} 0.1 \\ 0.55 \\ 0.35 \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} 6 \\ 1.2 \\ 0.3 \end{pmatrix}. \quad (3)$$

Согласно работе [11] константа экранирования для иона с зарядом Z_2 и числом электронов N_2 может быть записана в виде:

$$a = 0.8853 a_B Z_2^{-1.2} N_2^{0.87}, \quad a_B = 0.529 \text{ \AA}. \quad (4)$$

Подставляя $\rho(r)$ в виде (2), записывая $|\mathbf{R} - \mathbf{r}| = \sqrt{R^2 + r^2 - 2Rr \cos \theta}$ и интегрируя по θ и φ , имеем:

$$U(R) = \frac{Z_1 Z_2}{R} - \frac{Z_1 N_2}{2Ra^2} \times \sum_{i=1}^3 A_i B_i^2 \int_0^\infty dr \exp\left(-B_i \frac{r}{a}\right) (R + r - |R - r|). \quad (5)$$

¹⁾e-mail: babenko@npd.ioffe.ru

Разбивая интеграл на две части $r < R$ и $r > R$, получаем:

$$U(R) = \frac{Z_1(Z_2 - N_2)}{R} + \frac{Z_1 N_2}{R} \sum_{i=1}^3 A_i \exp\left(-B_i \frac{R}{a}\right). \quad (6)$$

В итоге нами получена формула, аналогичная предложенной в [11], которая описывает взаимодействие иона с зарядом Z_1 с ионом ($N_2 < Z_2$) или атомом решетки ($N_2 = Z_2$).

На рисунке 1 представлены потенциалы для системы H-Au, полученные в рамках DFT приближения (*Density Functional Theory* – теория функционала плотности) для газовой фазы и потенциал, описанный формулой (6). Как видно, они неплохо согласуются. На рисунке 1 представлены также потенциалы “атомная частица – твердое тело”, полученные нами из экспериментальных данных об энергетических спектрах и угловых зависимостях обратно рассеянных частиц [12], а также из анализа угловых распределений частиц, прошедших тонкую пленку золота [13]. Как видно, потенциал взаимодействия “ион – твердое тело”, полученный из эксперимента, заметно отличается от потенциала, описывающего столкновения в газовой фазе.

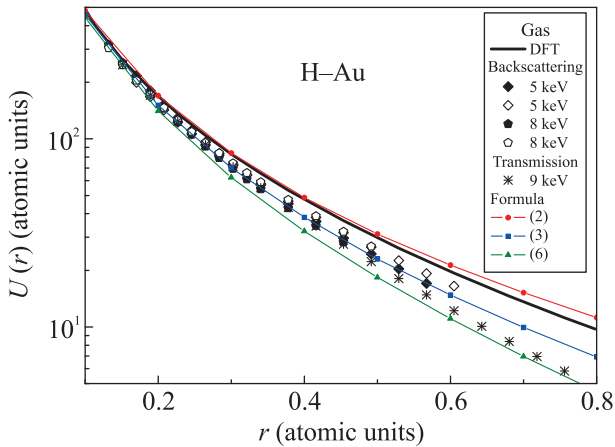


Рис. 1. Потенциал межатомного взаимодействия в зависимости от расстояния. Система H-Au. Приведен потенциал DFT для газовой фазы. Точками показаны данные из работ [12, 13], в которых значения потенциалов получены обработкой экспериментальных данных о рассеянии частиц на поверхности или прохождения через тонкие пленки. Линии с точками – расчет по формулам (6), (8), (11)

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

$$U_1(R) = \frac{Z_1}{R} \exp\left(-\frac{R}{R_D}\right), \quad (7)$$

где R_D – длина экранирования Дебая [14]. Для золота $R_D = 1.358$ а.е. Заменяя в формуле (1) кулоновский потенциал на потенциал экранированного кулоновского заряда и проводя аналогичное интегрирование, получаем потенциал взаимодействия иона, экранированного электронами проводимости, с решеткой металла (см. рис. 1):

$$U(R) = \frac{Z_1(Z_2 - N_2)}{R} \exp\left(-\frac{R}{R_D}\right) + \frac{Z_1 N_2}{R} \sum_{i=1}^3 A_i \exp\left(-B_i \frac{R}{a}\right) \exp\left(-\frac{R}{R_D}\right). \quad (8)$$

В случае атома водорода заряд ядра протона экранируется связанным электроном. В книге [15] для потенциала атома водорода из решения уравнения Пуассона получено выражение:

$$U_2(R) = \left(\frac{1}{R} + \frac{1}{a_B}\right) \exp\left(-\frac{2R}{a_B}\right), \quad (9)$$

здесь радиус Бора $a_B = 1$ в атомных единицах. Тот же результат может быть получен, если в формуле (1) записать электронную плотность для атома водорода в виде:

$$\rho(r) = \frac{1}{\pi a^3} \exp\left(-2\frac{r}{a_B}\right), \quad (10)$$

и провести соответствующее интегрирование по электронным координатам.

Заменяя в формуле (6) 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:

$$U(R) = \frac{Z_1 Z_2}{R} \sum_{i=1}^3 A_i \exp\left(-B_i \frac{R}{a}\right) \times \exp\left(-\frac{2R}{a_B}\right) \left(1 + \frac{R}{a_B}\right). \quad (11)$$

Как видно из рис. 1, потенциалы, учитывающие экранировку, неплохо описывают экспериментальные данные о потенциале для системы “водородная частица в металле”.

Для проверки полученных результатов мы провели моделирование угловых зависимостей частиц, прошедших тонкую пленку золота толщиной 143 Å с начальной энергией 9 кэВ, используя потенциалы (6), (8), (11). Методика расчета описана в работе [13]. Учитывались многократное рассеяние атомов

на аморфной мишени и тепловые колебания атомов мишени при комнатной температуре. Торможение на электронах рассматривалось с учетом поправки на многократность соударений, предложенной в работе [16]. Результаты моделирования приведены на рис. 2. Согласно работе [17] доля вышедших нейтральных атомов при начальной энергии 9 кэВ составляет 87.5%. Расчет для композитного пучка представлен на рис. 2 жирной линией и хорошо согласуется с экспериментальными данными.

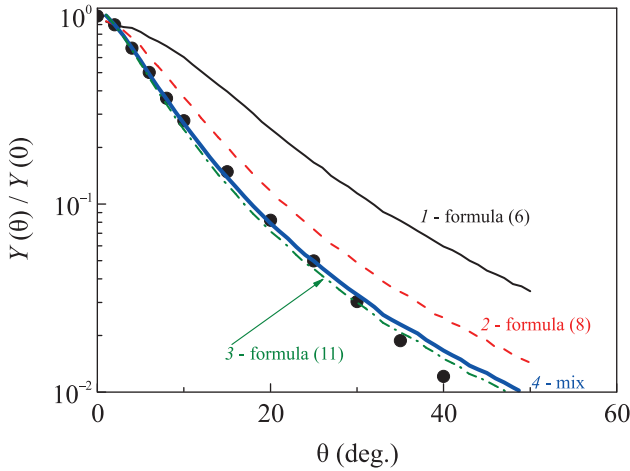


Рис. 2. (Цветной онлайн) Угловое распределение частиц, прошедших тонкую пленку золота. Точки – эксперимент [18]. Линии – наш расчет для потенциалов (6), (8), (11). Жирная линия – расчет для композитного пучка с содержанием нейтральных атомов 87.5%

Учет экранировки в потенциале влияет также на расчет ядерных тормозных способностей (ЯТС) при торможении частиц в материалах.

Ядерные тормозные способности удобно рассчитывать в системе центра масс (СЦМ), чтобы избежать неоднозначности зависимости угла рассеяния θ от прицельного параметра p , которая обычно возникает при рассеянии на потенциалах, имеющих потенциальные ямы. Тормозная способность dE/dx равна:

$$\frac{dE}{dx} = N \int_0^\infty 2\pi p \cdot T[\theta(p)] dp, \quad (12)$$

где N – плотность мишени. Потеря энергии при столкновении $T[\theta(p)]$ выражается формулой:

$$T[\theta(p)] = \frac{4M_1M_2}{(M_1 + M_2)^2} \sin^2 \left[\frac{\theta(p)}{2} \right] E, \quad (13)$$

M_1 и M_2 – массы сталкивающихся частиц, $\theta(p)$ – угол рассеяния в СЦМ, E – энергия соударения.

$$\theta(p) = \pi - 2p \cdot \int_{r_0}^\infty \frac{dr}{r^2 \sqrt{1 - \frac{U(r)}{E_{CM}} - \frac{p^2}{r^2}}}. \quad (14)$$

Здесь $U(r)$ – потенциал взаимодействия, $E_{CM} = E \cdot M_2 / (M_1 + M_2)$ – энергия столкновения в СЦМ, r_0 – корень уравнения:

$$1 - \frac{U(r_0)}{E_{CM}} - \frac{p^2}{r_0^2} = 0. \quad (15)$$

На рисунке 3 приведены ядерные тормозные способности в зависимости от энергии налетающих частиц для потенциалов, описываемых формулами (6), (8), (11). Как видно из рис. 3 учет экранировки значительно уменьшает ядерные тормозные способности при прохождении протонов (8) и атомов водорода (11), по сравнению с ЯТС для газовой мишени (расчет с потенциалом Мольера – Moliere).

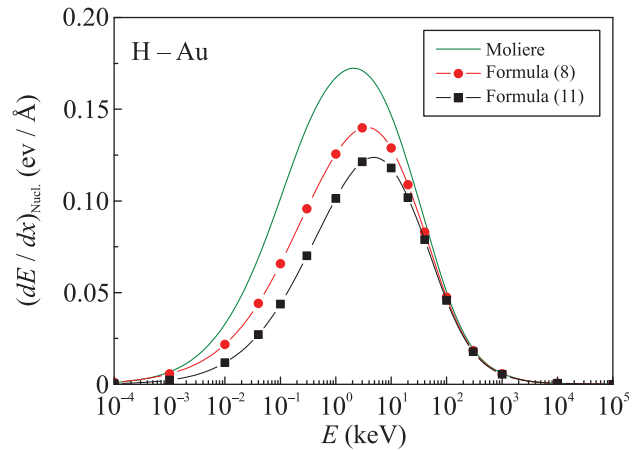


Рис. 3. (Цветной онлайн) Ядерные тормозные способности в зависимости от энергии бомбардирующих частиц. Рассматривается система H-Au. Расчет производится для потенциала Мольера и потенциалов, полученных по формуле (8) для протона в металле и формуле (11) для атома водорода

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.

1. J. Neufeld and R. H. Ritchie, *Phys. Rev.* **98**, 1632 (1955).
2. P. M. Echenique, F. Flores, and R. H. Ritchie, *Solid State Phys.* **43**, 229 (1990).
3. С. А. Майер, *Плазмоника: теория и приложения*, НИЦ “Регулярная и хаотическая динамика”, М. (2011).
4. Г. В. Дедков, *УФН* **165**, 919 (1995).
5. С. Bjorkas, N. Juslin, H. Timko, K. Vortler, K. Nordlund, K. Henriksson, and P. Erhart, *J. Phys.: Condens. Matter* **21**, 445002 (2009).
6. М. В. Прокофьев, В. В. Светухин, М. Ю. Тихончев, *Изв. Самарского НЦ РАН* **15**, 1024 (2013).
7. N. Juslina, P. Erhart, P. Träskelin, J. Nord, K. O. E. Henriksson, K. Nordlund, E. Salonen, and K. Albe, *J. Appl. Phys.* **98**, 123520 (2005).
8. H. W. Sheng, M. J. Kramer, A. Cadien, T. Fujita, and M. W. Chen, *Phys. Rev. B* **83**, 134118 (2011).
9. K. N. Dzhumagulova, E. O. Shalenov, and G. L. Gabdullina, *Phys. Plasmas* **20**, 042702 (2013).
10. В. Экштайн, *Компьютерное моделирование взаимодействия частиц с поверхностью твердого тела*, Мир, М. (1995).
11. K. Saitoh, *Rad. Eff.* **82**, 205 (1984).
12. П. Ю. Бабенко, А. Н. Зиновьев, В. С. Михайлов, Д. С. Тенсин, А. П. Шергин, *Письма в ЖТФ* **48**, 10 (2022).
13. П. Ю. Бабенко, А. Н. Зиновьев, Д. С. Тенсин, *ЖТФ* **92**, 1643 (2022).
14. С. Kittel, *Introduction to Solid State Physics*, 8th ed., John Wiley & Sons, NY (2005).
15. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Квантовая механика (нерелятивистская теория)*, т. 3, Физматлит, М. (2004).
16. А. Н. Зиновьев, П. Ю. Бабенко, *Письма в ЖЭТФ* **115**, 603 (2022).
17. R. Blume, W. Eckstein, and H. Verbeek, *NIM* **168**, 57 (1980).
18. M. Fama, G. H. Lantschner, J. C. Eckardt, C. D. Denton, and N. R. Arista, *NIMB* **164–165**, 241 (2000).