

01;02

©1994 г.

## ПОТЕНЦИАЛ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ АТОМОВ В ТЕОРИИ ТОМАСА-ФЕРМИ С ПОПРАВКОЙ НА ОБМЕН И ЕГО ПРИМЕНЕНИЯ

*Т.И. Жукова, О.Б. Фирсов*

Приводятся формулы для среднего потенциала атома (иона), движущегося в твердом теле, потенциала взаимодействия в плоскостном канале в осевом канале кристалла. Формулы получены на основе потенциала, приведенного в [1,2] (1977). Приводится расчет этого потенциала, опубликованный в [3]. Потенциал приведен в ат.ед.

$$U(R) = \frac{Z_a Z_b \text{Sh}^2 \left[ (Z_a^{1/3} + Z_b^{1/3})^{-1} \right]}{R \text{Sh} \left[ (Z_a^{1/3} + Z_b^{1/3})^{-1} + 0.5R \right]}$$

### Введение

На конференции в Ужгороде [3] была приведена формула для потенциала взаимодействия атомов по теории Томаса-Ферми с поправкой на обмен и к кинетической энергии электронов, аппроксимирующая с точностью 1% результаты расчета, произведенного авторами. Этот потенциал позволяет аналитически получить простую формулу для среднего потенциала взаимодействия движущегося атома в твердом теле, что может быть существенно при бомбардировке на поверхности тела атомами (ионами) под скользящими углами при сравнительно невысоких энергиях (кэВ). Далее, аналитически получается простая формула для движения атома в плоском канале кристалла и более сложная при аксиальном осевом каналировании. Этот потенциал в ат.ед.

$$U(R) = \frac{Z_a Z_b \text{Sh}^2 \alpha}{R \text{Sh}^2 [\alpha + 0.5R]}, \quad (1)$$

где  $\alpha = (Z^{1/3} + Z^{1/3})^{-1}$ .

## Средний потенциал взаимодействия атома, движущегося в твердом теле

Ввиду того что среднее расстояние между атомами твердого тела достаточно велико и плотность электронов в межатомном пространстве сравнительно мала, в уравнении Тамаса-Ферми с поправкой на обмен и градиентной поправкой к кинетической энергии

$$\nabla^2 \varphi = -4\pi \sum Z_i \delta(r - R_i) + 1.2\varphi^{3/2} + \varphi. \quad (2)$$

В межатомном пространстве наибольшим в (2) является линейный поправочный член, и потенциал в межатомном пространстве с достаточной точностью можно считать аддитивным. Соответственно аддитивным можно считать и потенциал взаимодействия движущегося атома с атомами твердого тела. Тогда средний потенциал

$$\begin{aligned} \bar{V}_0 &= \overline{\sum_i U_{\alpha i}(R_a - R_i)} = N \int_0^\infty U(R) 4\pi R^2 dR = \\ &= 4\pi N Z_a Z_b \text{Sh}^2 \alpha \int_0^\infty \frac{R dR}{\text{Sh}^2(\alpha + 0.5R)} = 16\pi N Z_a Z_b \text{Sh}^2 \alpha \ln(1 - e^{-2\alpha})^{-1}. \end{aligned} \quad (3)$$

Чтобы получить этот потенциал в эВ, выражая  $N$  через удельный вес  $p$  в CGS-системе ( $\text{г}\cdot\text{см}^{-3}$ ), можно переписать эту формулу в виде

$$\begin{aligned} \bar{V}_{[\text{эВ}]} &= 2.4 \frac{p}{A_b} 4\pi Z_a Z_b \text{Sh}^2 \alpha \ln [(1 - e^{-2\alpha})^{-1}] = \\ &= 30 \frac{p}{A_b} Z_a Z_b \text{Sh}^2 \alpha \ln [(1 - e^{-2\alpha})^{-1}], \end{aligned} \quad (4)$$

где  $A_b$  — атомный вес атомов твердого тела.

При малых углах скольжения при входе в твердое тело угол скольжения уменьшается. Если  $\alpha$  — угол скольжения при входе в твердое тело, то внутри тела атом движется с углом скольжения  $\alpha_1 = \sqrt{\alpha^2 - U/E}$ , где  $E$  — энергия бомбардирующих атомов. При угле скольжения  $\alpha < \sqrt{U/E}$  практически все частицы должны отражаться. Например, для пары В-Si  $U \approx 10$  эВ, для N-Si  $U \approx 13.4$  эВ, для Al-Si  $U \approx 22.2$  эВ, для P-Si  $U \approx 24.8$  эВ, для В-Ga  $U \approx 16.2$  эВ, для N-Ge  $U \approx 21.5$  эВ, для Al-Ge  $U \approx 40$  эВ, для Ga-Ge  $U \approx 72$  эВ, для As-Ge  $U \approx 76$  эВ.

### Плоскостное каналирование

Средний потенциал взаимодействия движущегося атома с плоскостью кристалла на расстоянии  $R$  от плотности

$$U = N 2\pi \int U R_1 \rho d\rho = N 2\pi Z_a Z_b \text{Sh}^2 \alpha \int_0^\infty \frac{\rho d\rho}{R_1 \text{Sh}^2(\alpha + 0.5R_1)}, \quad (5)$$

где  $R = \sqrt{R^2 + \rho^2}$ ,  $N$  — число атомов кристалла на единицу площади кристаллической плоскости, или

$$U = 2N\pi Z_a Z_b \text{Sh}^2 \alpha \int_R^\infty \frac{d\xi}{\text{Sh}^2(\alpha + 0.5\xi)} = 4\pi N \text{Sh}^2 \alpha \{\text{Cth}(\alpha + 0.5R) - 1\}. \quad (6)$$

При каналировании частица движется между двумя плоскостями. От одной плоскости расстояния  $r_1 = a/2 + x$ , а от другой плоскости  $r_2 = a/2 - x$ . Соответственно потенциал

$$U = 4\pi N Z_a Z_b \text{Sh}^2 \alpha \{\text{Cth}[\alpha + a/4 + x] + \text{Cth}[\alpha + a/4 - x] - 2\} = \\ = 8\pi N Z_a Z_b \text{Sh}^2 \alpha \frac{\text{Ch}2x - e^{-[2\alpha + a/2]}}{\text{Ch}[2\alpha + a/2] - \text{Ch}2x}. \quad (7)$$

Если учитывать другие плоскости, то

$$\bar{U} = 8\pi N Z_a Z_b \text{Sh}^2 \alpha \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\text{Ch}2x - e^{-[2\alpha + (|n|+1/2)a]}}{\text{Ch}[2\alpha + (|n| + 1/2)a] - \text{Ch}2x}. \quad (8)$$

Так как обычно  $a \approx 3$ , то учет других плоскостей вне канала дает незначительную поправку и, возможно, является превышением точности. В CGS-системе  $U$  надо умножить на  $a_0 e^2$ , т.е. на  $1.217 \cdot 10^{-27} \text{ г} \cdot \text{см}^4 \cdot \text{с}^{-2}$ , а чтобы получить  $U$  в эВ, необходимо разделить на  $1.6 \cdot 10^{-12}$ .

### Аксиальное каналирование атома

К сожалению, формула для потенциала при аксиальном каналировании довольно сложна, даже если ограничиваться аксиально-симметричной частью потенциала. Пусть потенциал создается цепочками атомов (числом  $m$ ), расположенных на поверхности цилиндра.

Потенциал, согласно Линхарду [4], можно записать как

$$U = \sum_{k=1}^m N \int \frac{Z_a Z_b \text{Sh}^2 \alpha dz}{\sqrt{(\rho - \rho_k)^2 + z^2} \text{Sh}^2 [\alpha + 0.5\sqrt{(\rho - \rho_k)^2 + z^2}]} = \\ = \sum_{k=1}^m \sum_{\nu=0}^{\infty} N \int_{-\infty}^{\infty} \frac{4 \cdot Z_a Z_b \text{Sh}^2 \alpha e^{-(\nu+1)[2\alpha + \{(\rho - \rho_k)^2 + z^2\}^{1/2}]} (\nu + 1)}{[(\rho - \rho_k)^2 + z^2]^{1/2}}. \quad (9)$$

Здесь используются цилиндрические координаты  $\rho, z, \varphi$ ;  $(\rho - \rho_k)^2 = \rho^2 + \rho_k^2 - 2\rho\rho_k \cos(\varphi - 2nk/m)$ . Начало координат в плоскости  $(\rho, \varphi)$  в центре, на оси канала:  $|\rho_k| = \rho_0$  — расстояния от оси до какой-либо из атомных цепочек;  $N$  — число атомов на единицу длины цепочки. Легко видеть, что каждый член суммы по  $\nu$  и  $k$  удовлетворяет уравнению

$$\frac{\partial^2 S_\nu}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial S_\nu}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2 S_\nu}{\partial \varphi^2} - (\nu + 1)^2 S_\nu = 0. \quad (10)$$

Решение этого уравнения выражается через модифицированные функции Бесселя

$$S_\nu = \sum_l A_{\nu l} I_l[(\nu + 1)\rho] \cos(l\varphi + \delta); \quad (11)$$

$$\frac{\partial^2 I_l}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial I_l}{\partial \rho} - \left( \frac{l^2}{\rho^2} + (\nu + 1)^2 \right) I_l = 0, \quad x = (\nu + 1)\rho; \quad (12)$$

$$I_l(x) = \left( \frac{x}{2} \right)^l \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(x/2)^{2k}}{k!(k+l)!}; \quad K_l(x) \approx (\pi/2x)^{1/2} e^{-x} \left( 1 + \frac{4l^2 - 1}{8x} + \dots \right), \quad (13)$$

где  $K_l[(\nu + 1)\rho]$  — решение (10), имеющее особенность при  $x = 0$ ,

$$K_l(x) \approx \frac{1}{2} \left( \frac{2}{x} \right)^l + \dots; \quad K_0(x) = \ln \frac{1}{x} + \dots \sim \left( \frac{\pi}{x} \right)^{1/2} e^{-x}. \quad (13')$$

Числа  $l$  по соображениям симметрии должны быть кратны порядку симметрии вращения вокруг оси. Если не приближаться к краю канала ближе, чем на  $\rho_0/2$ , где  $\rho_0$  — расстояние от ближайшего атома до оси, то можно ограничиться лишь аксиально-симметричными членами с  $l = 0$  (кроме, может быть, случая оси симметрии второго порядка, как в канале (110) гранецентрированной решетки).

Очевидно,  $A_{\nu 0}$  есть сумма потенциалов, создаваемых цепочками атомов в центре канала,

$$\begin{aligned} A_{\nu 0} &= m4Z_a Z_b \text{Sh}^2 \alpha \int \frac{e^{-[2\alpha + (\rho_0^2 + z^2)^{1/2}](\nu + 1)} (\nu + 1)}{(\rho_0^2 + z^2)^{1/2}} dz = \\ &= 8mZ_a Z_b \text{Sh}^2 \alpha e^{-2\alpha(\nu + 1)} K_0((\nu + 1)\rho_0), \end{aligned} \quad (14)$$

где  $\alpha = (Z_a^{1/3} + Z_b^{1/3})^{-1}$ .

Соответственно аксиально-симметричная часть потенциала есть

$$\bar{U}(\rho) = N8mZ_a Z_b \text{Sh}^2 \alpha \sum_{\nu=0}^{\infty} e^{-2(\nu + 1)\alpha} (\nu + 1) K_0[(\nu + 1)\rho_0] I_0[(\nu + 1)\rho]. \quad (15)$$

Если ряд  $\sum_{\nu=0}^{\infty} K_0[(\nu + 1)\rho_0](\nu + 1)^k$  плохо сходится, то при данных значениях  $\rho_0$ ,  $k > 3$  можно воспользоваться разложением  $I_0[(\nu + 1)\rho]$  в ряд (12) и заменить суммы интегралами:

$$\begin{aligned} \bar{U}(\rho) &= N8mZ_a Z_b \text{Sh}^2 \alpha \left\{ \sum_{k=0}^{\infty} \int_0^{\infty} \frac{K_0(x)x^{k+1} dx}{(2\alpha + \rho_0)^{2k+2}} \frac{\rho^{2k}}{2^{2k}(k!)^2} + K_0(\rho)e^{-2\alpha} - \right. \\ &\quad \left. - \int_0^{\infty} \frac{K_0(x)xdx}{(2\alpha + \rho_0)^2} \right\}. \end{aligned} \quad (16)$$

Учитывая, что

$$\int_0^{\infty} K_0(x)x^n dx = 2^{n-1} \left[ \Gamma\left(\frac{n+1}{2}\right) \right]^2, \quad (17)$$

так как при  $n = 2k + 1$ ,

$$\int_0^{\infty} K_0(x)x^{2k+1} dx = 2^{2k}(k!)^2,$$

формула (16) дает

$$\begin{aligned} \bar{U}(\rho) &= 8mZ_a Z_b \text{Sh}^2 \alpha \left[ e^{-2\alpha} K_0(\rho_0) - \frac{1}{(2\alpha + \rho_0)^2} + \frac{1}{(2\alpha + \rho_0)^2 - \rho^2} \right] = \\ &= 8mZ_a Z_b \text{Sh}^2 \alpha \left[ e^{-2\alpha} K_0(\rho_0) + \frac{\rho^2}{(2\alpha + \rho_0)^2 [(2\alpha + \rho_0)^2 - \rho^2]} \right] \end{aligned} \quad (18)$$

(так как  $2\alpha \ll \rho_0$ , то более точно включить  $2\alpha$  в  $K_0(x)$ :  $K_0[(\nu + 1)\rho] \rightarrow K_0[(\nu + 1)(2\alpha + \rho)]$ , чем пренебрегать  $e^{-2\alpha(\nu+1)}$ , а интеграл  $\int e^{-\alpha x} K_0(x)x^{2k+1} dx$  намного сложнее).

В общем случае коэффициенты в (14)  $A_{\nu l} \sim (\nu + 1)K_l$ , так что

$$\begin{aligned} U(\rho) &= Z_a Z_b \text{Sh}^2 \alpha \sum_l \sum_{k=0}^{m-1} \sum_{m=0}^{\infty} e^{-2(\nu+1)\alpha} (\nu + 1) K_l((\nu + 1)\rho_0) I_l((\nu + 1)\rho) \times \\ &\quad \times \cos l \left( \varphi - \frac{2\pi k}{m} \right), \end{aligned} \quad (19)$$

где  $l$  кратно порядку оси симметрии.

Так как

$$I_l(x) = \left( \frac{x}{2} \right)^l \sum \frac{(x/2)^n}{n!(n+l)!},$$

то

$$\begin{aligned} U(\rho) &= Z_a Z_b 8 \text{Sh}^2 \alpha \sum_l \sum_{k=0}^{m-1} \sum_{\nu=0}^{\infty} e^{-2(\nu+1)\alpha} K_l((\nu + 1)\rho_0) \left( \frac{\rho}{2} \right)^{l+2n} \frac{(\nu + 1)^{l+2n+1}}{n!(n+l)!} \times \\ &\quad \times \cos l \left( \varphi - \frac{2\pi k}{m} \right). \end{aligned} \quad (20)$$

Если  $\rho_0 \simeq 2$ , то для  $l \geq 2$  ряды сходятся плохо и можно сумму по  $\nu$  заменить интегралом.

Так как

$$\int_0^{\infty} K_l(x) X^{l(2n+1)} dx = 2^{l+2n} (l+n)! n!, \quad (21)$$

то

$$\int_0^{\infty} K_l(x\rho_k)I_l(x\rho)xdx = \int_0^{\infty} K_l(y)I_l(y, \rho/\rho_k) = \frac{1}{\rho_k^2 - \rho^2} \quad (22)$$

(так как на самом деле всюду фигурирует  $\int e^{-2\alpha x} K_l(x\rho_k)I_l(x\rho)xdx$ , то приближенно можно заменить  $\rho_k\rho 2\alpha + \rho_k$ ), тогда можно записать

$$\int_0^{\infty} e^{-2\alpha x} K_l(x\rho_k)I_l(x\rho)xdx \simeq \frac{1}{(2\alpha + \rho_k)^2 - \rho^2},$$

следовательно,

$$U(\rho) = 8Z_a Z_b \text{Sh}^2 \alpha \sum_l \sum_{k=0}^{m-1} \sum_n \rho \frac{\rho^{2n}}{(2\alpha + \rho_0)^{2+2n}} \cos l \left( \varphi - \frac{2\pi k}{m} \right),$$

а точнее

$$U(\rho) = 8Z_a Z_b \text{Sh}^2 \alpha \sum_{k=0}^{m-1} \left[ K_0(\rho_k) - \frac{1}{(2\alpha + \rho_k)^2} + \sum_{l=0}^{\infty} \frac{\rho^l}{(2\alpha + \rho_k)^{(l+2)}} \times \right. \\ \left. \times \frac{\cos l(\varphi - \varphi_k)}{1 - \rho^2/(2\alpha + \rho_k)^2} \right] = 8Z_a Z_b \text{Sh}^2 \alpha \sum_{k=0}^{m-1} \left[ K_0(\rho_k) + \frac{\rho^2}{(2\alpha + \rho_k)^2 [(2\alpha + \rho_k)^2 - \rho^2]} + \right. \\ \left. + \sum_{l=2}^{\infty} \frac{\rho^2 \cos l(\varphi - \varphi_k)}{(2\alpha + \rho_k)^2 [(2\alpha + \rho_k)^2 - \rho^2]} \right]. \quad (23)$$

Здесь для общности сделана замена  $\rho_0 \rightarrow \rho_k$  и  $2\pi k/m \rightarrow \varphi_k$ , так как в случае, например, канала 110 гранецентрированной решетки, имеющего ось симметрии второго порядка, расстояния от оси канала до ближайших атомных цепочек в направлениях 100 и 101 разные (равны  $a/2$  и  $a/2\sqrt{2}$ , где  $a$  — постоянная решетки).

Подробнее расчеты формул для потенциала взаимодействия между атомами с поправкой на обмен и градиентной поправкой к теории Томаса–Ферми излагаются в [5]. Краткое изложение расчета предполагается опубликовать в ЖТФ.

Расчет был основан на использовании двух ядер по теории Томаса–Ферми–Дирака. Одно выражение дает минимальное значение энергии при подстановке точного значения решения уравнения Томаса–Ферми–Дирака, в то время как другое дает максимальное значение энергии (которые в этом случае совпадают). На самом деле поправка Дирака на обмен [6], а также поправка на кинетическую энергию [7,8] учитываются в первом приближении. В остальном это соответствует работам [9,10]. Таким образом, в “минимальном принципе” в качестве плотности электронов бралась сумма плотностей изолированных атомов, затем подынтегральное выражение записывалось через соответствующие потенциалы, а в “максимальном принципе” потенциал выражался через

сумму потенциалов изолированных атомов. В результате для энергии взаимодействия получалось

$$U(R) = \frac{Z_a Z_b}{2R} (\chi_a(R) + \chi_b(R)) + \lambda \int S(r_a, r_b)(dr),$$

$$\tilde{U}(R) = \frac{Z_a Z_b}{2R} (\chi_a(R) + \chi_b(R)) + \lambda \int \tilde{S}(r_a, r_b)(dr), \quad (24)$$

где  $R$  — расстояния между ядрами;  $\chi_{a,b}$  — функция экранирования для изолированного атома;  $r_{a,b}$  — расстояние от ядер атомов  $a$  и  $b$  соответственно;  $\lambda$  — численный коэффициент, равный  $2/3\pi^2$ ,

$$S = \frac{3}{5} \left[ (\varphi_a^{2/3} + \varphi_b^{3/2}) - \varphi_a^{5/2} - \varphi_b^{5/2} \right] - (\varphi_a^{3/2} \varphi_b + \varphi_a \varphi_b^{3/2}),$$

$$\tilde{S} = (\varphi_a^{3/2} \varphi_b + \varphi_a \varphi_b^{3/2}) - \frac{4}{5} \left[ (\varphi_a + \varphi_b)^{5/2} - \varphi_a^{5/2} - \varphi_b^{5/2} \right]. \quad (25)$$

Интегрирование в (1) производилось по переменным  $r_a$  и  $r_b$  (двойные интегралы).

Оба эти выражения для  $S$  и  $\tilde{S}$  порядка  $\varphi_a^{3/2} \varphi_b + \varphi_a \varphi_b^{3/2}$ , и можно написать

$$S = K(\varphi_a^{3/2} \varphi_b + \varphi_a \varphi_b^{3/2}),$$

$$\tilde{S} = \tilde{K}(\varphi_a^{3/2} \varphi_b + \varphi_a \varphi_b^{3/2}). \quad (26)$$

При этом коэффициенты  $K$  меняются от  $K = -0.293$ ,  $\tilde{K} = -0.46$  для  $\varphi_b = \varphi_a$  до  $K = -1$  и  $\tilde{K} = -1$  при  $\varphi_b \ll \varphi_a$  или наоборот.

Так как соответствующие члены в выражениях для  $U$  или  $\tilde{U}$  дают сравнительно небольшой вклад, то в расчете было выбрано среднее значение  $K = \tilde{K} = -0.625$ , что практически не вносит ошибки, но сильно упрощает расчет. Замена переменного  $K$  на постоянное позволило интегрирование по одной из переменных ( $r_a$  или  $r_b$ ) произвести аналитически, что сильно упростило расчет.

### Список литературы

- [1] Schwinger T. // Phys. Rev. A. 1981. Т. 24. С. 2353.
- [2] Фирсов О.Б. // Тез. VI ВКЭАС. Тбилиси. 1975. С. 146.
- [3] Жукова Т.И., Фирсов О.Б. // X Всесоюз. конф. по физике электронных и атомных столкновений. Ужгород, 1988. Т. 2.
- [4] Lindhard J. // Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk. 1965. N 14. P. 945.
- [5] Фирсов О.Б., Жукова Т.И. // Препринт ИАЗ-5386. № 6. М., 1991.
- [6] Dirac P.A.M. // Proc. Camb. Phil. Soc. 1930. Vol. 26. P. 376.
- [7] Компанец А.С., Павловский Е.С. // ЖЭТФ. 1956. Т. 31. С. 427.
- [8] Куржниц Д.А. // ЖЭТФ. 1957. Т. 32. С. 115.
- [9] Фирсов О.Б. // ЖЭТФ. 1957. Т. 32. С. 1464.
- [10] Фирсов О.Б. // ЖЭТФ. 1957. Т. 33. С. 696.

Российский научный центр  
"Курчатовский институт"  
Москва

Поступило в Редакцию  
31 мая 1993 г.