

02;13

## Определение потенциала взаимодействия ион–твердое тело из спектров обратнорассеянных частиц

© П.Ю. Бабенко, А.Н. Зиновьев, В.С. Михайлов, Д.С. Тенсин, А.П. Шергин

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Россия

E-mail: zinoviev@inprof.ioffe.ru

Поступило в Редакцию 22 апреля 2022 г.

В окончательной редакции 22 апреля 2022 г.

Принято к публикации 26 мая 2022 г.

Впервые получены значения потенциала атомная частица–твердое тело из экспериментальных данных об энергетических спектрах и угловых зависимостях обратнорассеянных частиц. Предложенная процедура определения потенциала ранее не применялась. Показано, что получаемые данные не зависят от используемой аппроксимации потенциала. Потенциал взаимодействия ион–твердое тело заметно отличается от потенциала, описывающего столкновения в газовой фазе. Константа экранирования возрастает на 10–15%. Увеличение экранировки обусловлено возрастанием плотности электронного газа в области между налетающей частицей и рассеивающим центром.

**Ключевые слова:** потенциал межатомного взаимодействия, энергетические спектры, рассеяние атомных частиц на поверхности.

DOI: 10.21883/PJTF.2022.14.52862.19231

Данные о потенциале определяющим образом влияют на результаты моделирования процессов отражения частиц от поверхности, прохождения через тонкие пленки, моделирования пробега частиц, распыления и энерговыделения. Эти процессы существенны для определения взаимодействия частиц плазмы с первой стенкой токамака-реактора, при моделировании процессов ионной имплантации и анализе результатов определения характеристик приповерхностных слоев с использованием рассеяния ионов и атомов. Данные о потенциалах напрямую определяют значения ядерных тормозных потерь при прохождении пучков атомных частиц в веществе.

При моделировании столкновений атомных частиц с твердым телом чаще всего используются экранированные кулоновские потенциалы: Мольера [1], ZBL (Ziegler–Biersack–Littmark) [2], Ленца–Йенсена [3,4], Кг–С [5]. В работе [6] был предложен потенциал, в настоящее время наилучшим образом описывающий эксперименты по рассеянию частиц в газовой фазе. В [7] было проведено сравнение расчетов, выполненных в приближении функционала плотности (DFT) с использованием пакета программ DMol для выбора базиса используемых волновых функций, и экспериментальных данных о потенциалах, было достигнуто хорошее согласие с экспериментом. Потенциалы DFT с коррекцией на экспериментальные данные о параметрах потенциальной ямы успешно использовались для моделирования коэффициентов отражения частиц от различных мишеней [8] и для расчета ядерных тормозных способностей [9]. Некоторые авторы пытаются учитывать влияние особенностей взаимодействия частиц с твердым телом при разработке потенциалов для расчетов методом молекулярной динамики [10–12].

При моделировании энергетических спектров рассеянных частиц с помощью компьютерных кодов отмечалась необходимость корректировки константы экранирования в потенциале для лучшего согласия с экспериментом [13]. В нашей работе [14] при исследовании эффекта радужного рассеяния атомов на поверхности металлических кристаллов из экспериментальных данных для большого числа систем были получены потенциалы взаимодействия, которые сильно отличаются от потенциалов, используемых для описания рассеяния в газовой фазе. Данный эффект был объяснен влиянием наведенного заряда в металле налетающим атомом [14]. Подобное влияние наблюдалось также в работе [15] при описании полуканализирования ионов  $N_2^+$  на кристалле меди. В отличие от газовой фазы определение потенциала из эксперимента для столкновений в твердом теле затруднено из-за влияния многократного рассеяния и торможения частиц, а также из-за изменения заряда частицы при прохождении через твердое тело. Попыток получить сведения о потенциале путем моделирования энергетических и угловых спектров обратнорассеянных частиц ранее не предпринималось.

Для описания рассеяния частиц при бомбардировке твердого тела мы использовали наш код, основанный на методе Монте-Карло и приближении парных взаимодействий. Для описания мишени использовалась микрокристаллическая модель [16], в которой для учета корреляции в расположении ближайших соседей рассматривается кластер атомов размером в одну постоянную решетку. Положение первого атома и ориентация кластера выбирались случайным образом. После акта соударения строился следующий кластер, ориентированный случайно в пространстве. В нашей программе потери энергии, связанные с рассеянием на атомах мишени,

**Таблица 1.** Параметры в потенциале Зиновьева

Энергия, keV	$c_1$	$c_2$	$c_3$	Ошибка, %
5	1.954	1.120	0.017	6.8
8	1.875	1.123	0	8.5

**Таблица 2.** Параметры в потенциале Мольера

Энергия, keV	$c_1$	$d_1$	$c_2$	$d_2$	Ошибка, %
5	0.462	0.427	0.5775	1.431	6.9
8	0.455	0.480	0.5775	1.536	8.9

рассчитываются точно для используемого потенциала взаимодействия. Для описания торможения на электронах использовались данные из работы [17], величина поправки на неупругие потери при соударении рассчитывалась как произведение тормозной способности для рассматриваемой энергии столкновения на длину траектории между последовательными актами соударения. Учитывались тепловые колебания атомов мишени.

Экспериментальные данные по рассеянию ионов водорода на золоте взяты нами из работы [18]. Особенность этого эксперимента состояла в том, что регистрировались все рассеянные частицы — как заряженные, так и нейтральные. Тем самым устранялась ошибка, связанная с неопределенностью доли заряженных частиц в общем потоке рассеянных частиц. Авторы измеряли энергетические спектры в достаточно широком диапазоне энергий рассеянных частиц для двух начальных энергий бомбардирующих ионов:  $E_0 = 5$  и  $8$  keV. Энергетические спектры были измерены в диапазоне углов  $\beta$  от  $25$  до  $85^\circ$  с шагом  $10^\circ$ . Угол вылета отсчитывался от нормали к поверхности. Энергетическое разрешение спектрометра  $\Delta E/E = 0.019$ .

Для определения параметров потенциала использовались потенциалы Зиновьева [6] и Мольера [1] с варьированием параметров. В итоге достигалось наилучшее согласие с экспериментом одновременно для всей совокупности экспериментальных данных для конкретной энергии соударения.

Потенциал Зиновьева

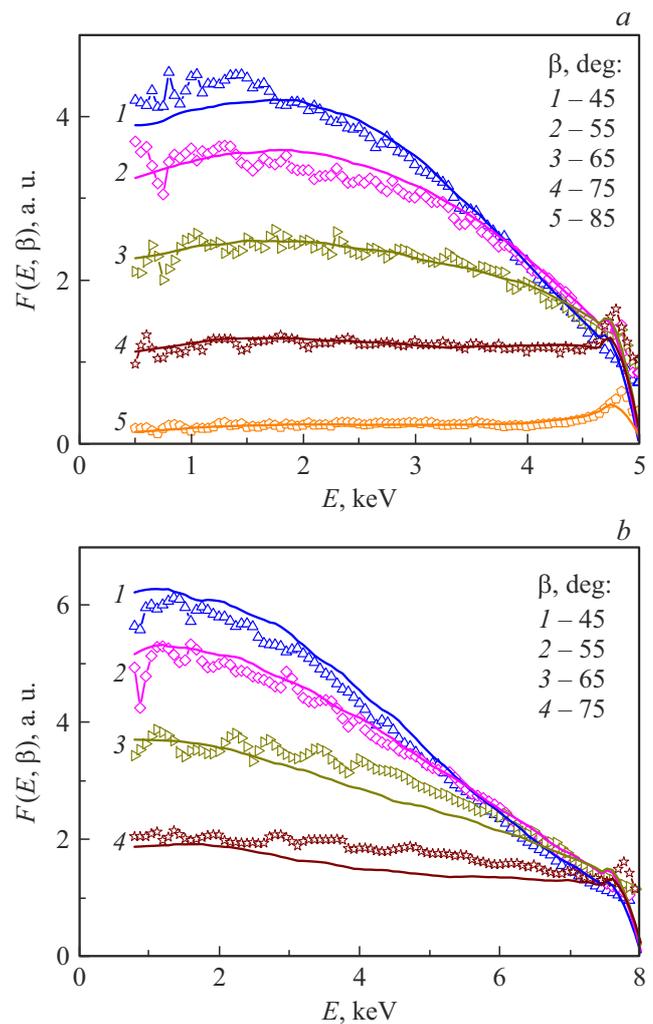
$$U(R) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{R} \exp\{-B(x)x\},$$

$$B(x) = \frac{c_1}{1 + c_2 x^{1/2} + c_3 x}, \quad x = \frac{R}{a_f}.$$

Здесь  $Z_1$  и  $Z_2$  — заряды ядер сталкивающихся частиц,  $R$  — межъядерное расстояние. В качестве длины экранирования  $a_f$  использовался параметр, предложенный Фирсовым [19]:

$$a_f = 0.88534 a_B (Z_1^{1/2} + Z_2^{1/2})^{-2/3}, \quad a_B = 0.529 \text{ \AA},$$

где  $a_B$  — радиус Бора.



**Рис. 1.** Интенсивность рассеянных частиц для энергий соударения  $E_0 = 5$  (a) и  $8$  keV (b). Точки — экспериментальные данные из работы [18], линии — наш расчет.  $\beta$  — угол вылета относительно нормали к поверхности.

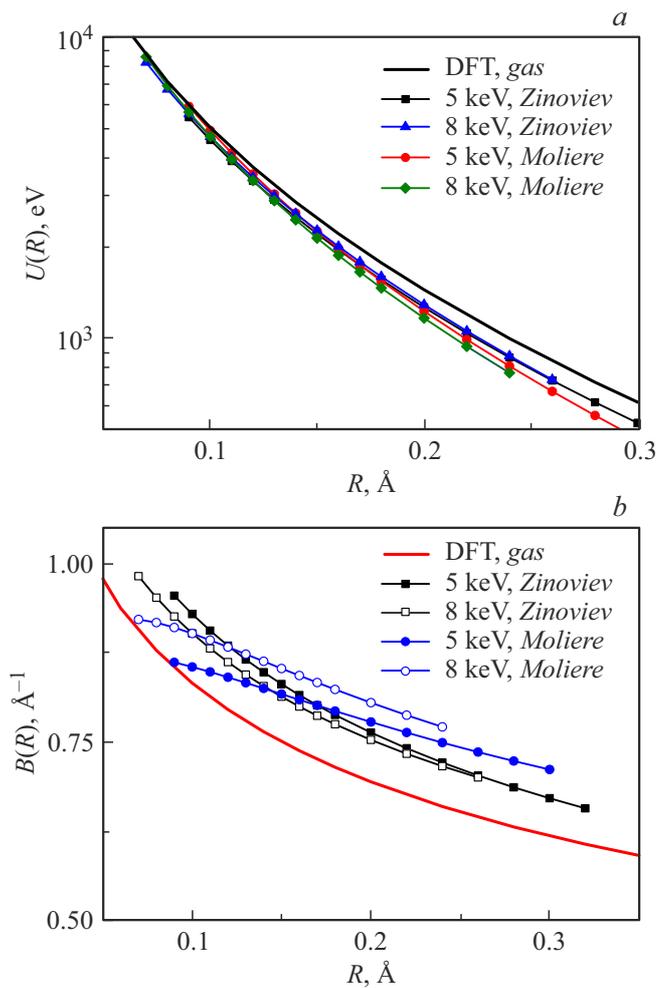
Потенциал Мольера использовался в виде

$$U(R) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{R} \sum_{i=1}^3 c_i \exp\left(-d_i \frac{R}{a_f}\right).$$

Параметры, при которых эксперимент описывается наилучшим образом, приведены в табл. 1 и 2. При использовании потенциала Мольера параметры  $c_3$  и  $d_3$  не влияли на результат, так как описывают взаимодействие с  $K$ -оболочкой мишени, а такие межъядерные расстояния в обсуждаемом эксперименте не достигались.

На рис. 1 приведено сравнение экспериментальных и расчетных спектров для различных углов рассеяния и энергий соударения. Для облегчения восприятия приведены данные только для части углов.

Восстановленные из эксперимента потенциалы представлены на рис. 2, a. Как видно из рис. 2, a, полученные значения слабо зависят от используемой формы потен-



**Рис. 2.** *a* — восстановленные из эксперимента потенциалы межатомного взаимодействия для различных энергий соударения и различных математических формул для потенциала. Полученные данные о потенциалах приведены для диапазонов энергий рассеянных атомов, наблюдаемых в эксперименте [18]. Потенциал DFT рассчитан для столкновений в газовой фазе. *b* — функция экранирования  $B(R)$  для приведенных на части *a* случаев. Жирная линия — данные для потенциала DFT в случае столкновений в газовой фазе.

циала, что указывает на достоверность применяемой методики. Мы предполагали, что при рассеянии протонов в твердом теле достигается равновесное распределение пучка по заряду частицы, но оно может быть разным для различных начальных энергий. Поэтому параметры потенциала для различных энергий определялись независимо. Как видно из рис. 2, *a*, данные для разных энергий близки, что лишний раз подтверждает устойчивость процедуры определения параметров потенциала. На рис. 2, *a* приведен также потенциал для столкновений в газовой фазе, полученный при использовании метода DFT. Видно, что полученные нами потенциалы для столкновения в твердой фазе значительно от него отличаются.

На рис. 2, *b* представлена функция экранирования  $B(R)$  для приведенных на рис. 2, *a* случаев

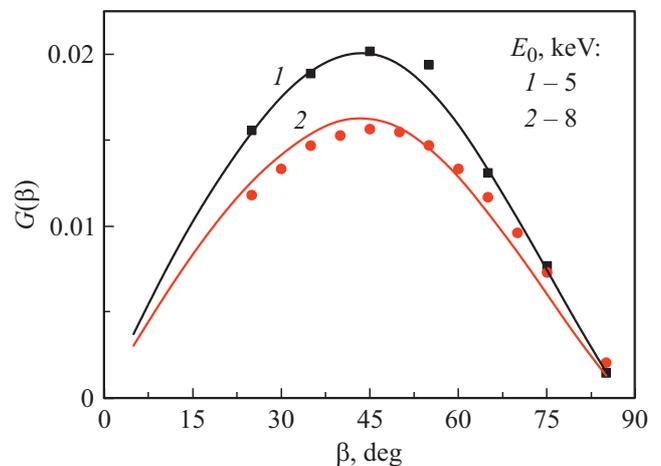
$$B(R) = -\ln \left[ \frac{U(R)R}{Z_1 Z_2 e^2} \right] \frac{a_f}{R}.$$

Как видно из рис. 2, *b*, полученные потенциалы характеризуются возрастанием функции экранирования (или уменьшением длины экранирования) на 10–15% по сравнению с потенциалами, применяемыми для столкновений в газовой фазе. Данный эффект, на наш взгляд, обусловлен возмущением плотности электронного газа в металле налетающей частицей. Возрастание плотности электронного газа в области между налетающей частицей и рассеивающим центром и приводит к увеличению экранировки в потенциале взаимодействия. При уменьшении межъядерного расстояния наблюдается сближение значений потенциалов для газовой и твердой фаз.

Еще одним из критериев правильного подбора потенциала взаимодействия при машинном моделировании является совпадение угловых зависимостей рассеянных частиц с экспериментальными данными. На рис. 3 приведено угловое распределение обратнорассеянных атомов водорода, проинтегрированное по всем выходным энергиям, для начальных энергий  $E_0 = 5$  и 8 keV. По оси ординат отложена функция  $G(\beta)$ , равная числу отраженных частиц на падающий протон и интервал угла выхода  $\Delta\beta = 5^\circ$ :

$$G(\beta) = 4\pi \sin\left(\frac{\Delta\beta}{2}\right) \sin\beta \int_0^{E_0} F(E, \beta) dE.$$

Таким образом, впервые определены параметры потенциала для системы ион–твердое тело из экспериментальных данных (на примере экспериментальных данных об энергетических и угловых распределениях обратнорассеянных частиц при бомбардировке протонами мишени из золота). Полученный потенциал заметно



**Рис. 3.** Угловое распределение обратнорассеянных атомов водорода для начальных энергий  $E_0 = 5$  и 8 keV. Точки — эксперимент, линии — расчет.

отличается от потенциалов, применяемых для описания рассеяния в газовой фазе, и характеризуется заметным увеличением константы экранирования.

### Финансирование работы

Исследование выполнено при поддержке гранта Российского научного фонда № 22-22-20081, <https://rscf.ru/project/22-22-20081/>, а также при поддержке гранта Санкт-Петербургского научного фонда в соответствии с соглашением от 14 апреля 2022 г. № 22/2022.

### Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

### Список литературы

- [1] G. Moliere, Z. Naturforsch. A., **2** (3), 133 (1947). DOI: 10.1515/zna-1947-0302
- [2] J.F. Ziegler, J.P. Biersack, U. Littmark, *The stopping and range of ions in solids*. Ser.: Stopping and range of ions in matter (Pergamon, N.Y., 1985).
- [3] W. Lenz, Z. Phys., **77** (11-12), 713 (1932). DOI: 10.1007/BF01342150
- [4] H. Jensen, Z. Phys., **77** (11-12), 722 (1932). DOI: 10.1007/BF01342151
- [5] W.D. Wilson, L.G. Haggmark, J.P. Biersack, Phys. Rev. B, **15** (5), 2458 (1977). DOI: 10.1103/PhysRevB.15.2458
- [6] A.N. Zinoviev, Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B, **269** (9), 829 (2011). DOI: 10.1016/j.nimb.2010.11.074
- [7] A.N. Zinoviev, K. Nordlund, Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B, **406** (Pt B), 511 (2017). DOI: 10.1016/j.nimb.2017.03.047
- [8] D.S. Meluzova, P.Yu. Babenko, A.P. Shergin, K. Nordlund, A.N. Zinoviev, Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B, **460**, 4 (2019). DOI: 10.1016/j.nimb.2019.03.037
- [9] A.N. Zinoviev, P.Yu. Babenko, K. Nordlund, Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B, **508**, 10 (2021). DOI: 10.1016/j.nimb.2021.10.001
- [10] A. Agrawal, R. Mishra, L. Ward, K.M. Flores, W. Windl, Modelling Simul. Mater. Sci. Eng., **21** (8), 085001 (2013). DOI: 10.1088/0965-0393/21/8/085001
- [11] C. Bjorkas, N. Juslin, H. Timko, K. Vortler, K. Nordlund, K. Henriksson, P. Erhart, J. Phys.: Condens. Matter, **21** (44), 445002 (2009). DOI: 10.1088/0953-8984/21/44/445002
- [12] M.-C. Marinica, L. Ventelon, M.R. Gilbert, L. Proville, S.L. Dudarev, J. Marian, G. Bencteux, F. Willaime, J. Phys.: Condens. Matter, **25** (39), 395502 (2013). DOI: 10.1088/0953-8984/25/39/395502
- [13] B. Bruckner, T. Strapko, M.A. Sortica, P. Bauer, D. Primetzhofer, Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B, **470**, 21 (2020). DOI: 10.1016/j.nimb.2020.02.018
- [14] П.Ю. Бабенко, Д.С. Мелузова, А.П. Солоницына, А.П. Шергин, А.Н. Зиновьев, ЖЭТФ, **155** (4), 612 (2019). DOI: 10.1134/S0044451019040047 [P.Yu. Babenko, D.S. Meluzova, A.P. Solonitsyna, A.P. Shergin, A.N. Zinoviev, JETP, **128** (4), 523 (2019). DOI: 10.1134/S1063776119030014].
- [15] V.I. Shulga, Rad. Eff., **100** (1-2), 71 (1986). DOI: 10.1080/00337578608208737
- [16] Д.С. Мелузова, П.Ю. Бабенко, А.П. Шергин, А.Н. Зиновьев, Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования, № 4, 74 (2019). DOI: 10.1134/S0207352819040127 [D.S. Meluzova, P.Yu. Babenko, A.P. Shergina, A.N. Zinoviev, J. Synch. Investig., **13** (2), 335 (2019). DOI: 10.1134/S1027451019020332].
- [17] S.N. Markin, D. Primetzhofer, S. Prusa, M. Brunmayr, G. Kowarik, F. Aumayr, P. Bauer, Phys. Rev. B, **78** (19), 195122 (2008). DOI: 10.1103/PhysRevB.78.195122
- [18] H. Verbeek, W. Eckstein, R.S. Bhattacharya, J. Appl. Phys., **51** (3), 1783 (1980). DOI: 10.1063/1.327740
- [19] О.Б. Фирсов, ЖЭТФ, **33** (3), 696 (1957). [O.B. Firsov, Sov. Phys. JETP, **6** (3), 534 (1958).]