

## Потенциалы межатомного взаимодействия при соударении частиц с энергиями 1–300 keV

© А.Н. Зиновьев

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН,  
194021 Санкт-Петербург, Россия  
e-mail: zinoviev@inprof.ioffe.rssi.ru

(Поступило в Редакцию 30 ноября 2006 г. В окончательной редакции 21 мая 2007 г.)

Из экспериментальных данных о рассеянии атомных частиц с энергией 1–300 keV получены потенциалы взаимодействия для систем  $\text{Ar}^+$ ,  $\text{C}^+$ ,  $\text{Cd}^+$ ,  $\text{Kr}^+$ ,  $\text{Ne}^+$ ,  $\text{Xe}^+$ ,  $\text{Zn}^+$ –Xe,  $\text{Ar}^+$ –Ar и  $\text{Ne}^+$ –Ne. Предложен модельный потенциал, наилучшим образом описывающий экспериментальные данные, и даны оценки погрешности его применения для описания рассеяния частиц при различных расстояниях наибольшего сближения.

PACS: 34.20.-b

### Введение

Потенциалы взаимодействия атомных частиц широко используются для моделирования профилей концентрации по глубине при ионной имплантации, при расчете образования дефектов во время прохождения частиц через твердое тело, при разработке методов исследования поверхности с использованием рассеяния ионов и во многих других приложениях.

В настоящей работе будут рассматриваться в основном столкновения ионов с атомами. При столкновениях частиц с энергией, превышающей 10 keV, и заметных углах рассеяния различие потенциалов для пары ион–атом и пары атом–атом невелико, а при меньших энергиях это различие следует учитывать. В качестве параметра, описывающего это различие, может быть использовано отношение потенциала ионизации атома к потенциалу взаимодействия в точке поворота траектории при столкновении частиц.

Проблема выбора наиболее удачной теоретической модели потенциала для описания рассеяния атомных частиц обсуждалась во многих работах [1–10]. Первые сведения о потенциалах взаимодействия частиц при тесном сближении, когда во взаимодействие вовлекаются внутренние оболочки сталкивающихся атомных частиц, были получены в экспериментах Эверхарта с сотрудниками [9]. Было показано, что потенциал, предложенный Фирсовым [11], удовлетворительно описывает эксперимент. В работе [10], где изучалось влияние многоканальности рассеяния на получаемые потенциалы, также был сделан вывод о хорошей применимости модели одноканального или „среднего“ потенциала для описания рассеяния частиц с энергиями 12–300 keV, а наилучшее согласие было достигнуто с потенциалом, предложенным Ксавинским [12].

В работе [8] различные теоретические типы потенциалов сравнивались с известным в то время набором экспериментальных данных о потенциалах, полученных в основном при небольших энергиях соударения.

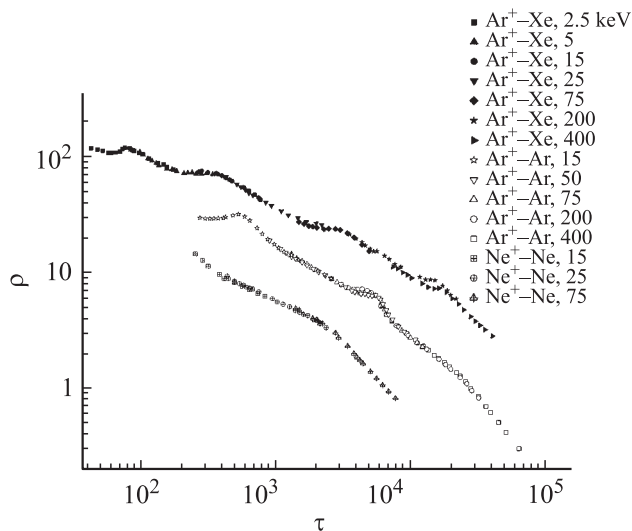
Был сделан вывод о сравнительно хорошей применимости потенциала, предложенного Бирзаком, Циглером и Литтмарком [7] (будем называть его в дальнейшем „потенциал БЦЛ“) Этот потенциал получен на основе усреднения расчетов потенциалов в рамках статистической модели атома для большого числа систем. Тем не менее и после появления [8] во многих работах применялись с большим или меньшим успехом и другие типы потенциалов, в частности потенциалы Мольера [13] и Йенсена [14]. Часто для получения согласия с экспериментом варьировались различные параметры теоретических потенциалов, при этом точность применения потенциалов для неисследованных случаев не анализировалась. Подобная ситуация связана с недостаточным количеством экспериментальных данных о потенциалах.

В задачи настоящей работы входило заполнить этот пробел и оценить точность используемых моделей для потенциалов.

### Используемые экспериментальные данные и методика их обработки

Для обработки были выбраны данные измерений абсолютных сечений рассеяния частиц, полученные в работах [15–17]. Авторы этих работ оценили точность относительных измерений в 1–4%, а измерений абсолютной величины сечений — в 8%. Измерения выполнялись в достаточно широком интервале углов рассеяния и в широком диапазоне энергий соударения — 1.5–300 keV — для большого числа пар.

Сопоставление данных о сечениях рассеяния при различных энергиях соударения удобно проводить в приведенных координатах  $\rho = \theta d\sigma/d\Omega \sin \theta$  и  $\tau = E_{cm}\theta$  ( $E_{cm}$  и  $\theta$  — энергия соударения и угол рассеяния в системе центра масс). На рис. 1 в приведенных координатах представлены данные для систем  $\text{Ar}^+$ –Xe,  $\text{Ar}^+$ –Ar и  $\text{Ne}^+$ –Ne [15–17]. Как видно из рис. 1, зависимости



**Рис. 1.** Сечения рассеяния при различных значениях энергии соударения для систем  $\text{Ar}^+ - \text{Ar}$ ,  $\text{Ne}^+ - \text{Ne}$  и  $\text{Xe}^+ - \text{Xe}$  в приведенных координатах.

сечения рассеяния от энергии соударения не носят гладкого характера. Наблюдаются максимумы, связанные с многоканальностью рассеяния [10]. Однако расхождение данных о сечениях для разных энергий соударения для приведенных случаев не превышает 1–3%. Это позволяет сделать вывод, что потенциал, описывающий рассеяние для изучаемых систем, практически не зависит от энергии соударения.

Для получения информации о потенциале из эксперимента нами использовалась процедура, предложенная Фирсовым [18]. Вначале с использованием измеренных сечений вычисляется функция

$$b(\theta) = \left\{ 2 \int_{\pi}^{\theta} d\sigma(\theta)/d\Omega \sin \theta d\theta \right\}^{1/2}, \quad (1)$$

связывающая угол рассеяния  $\theta$  и прицельный параметр удара  $b$ . По функции  $b(\theta)$  легко получить обратную функцию  $\theta(b)$ , а из нее по формуле Фирсова — значение потенциала в точке поворота траектории  $R_0$ , достигаемой при прицельном параметре  $b$ :

$$U(R_0(b)) = E_{cm} \left( 1 - \exp \left( - \frac{2}{\pi} \int_b^{\infty} \theta(b') (b'^2 - b^2)^{-1/2} db' \right) \right),$$

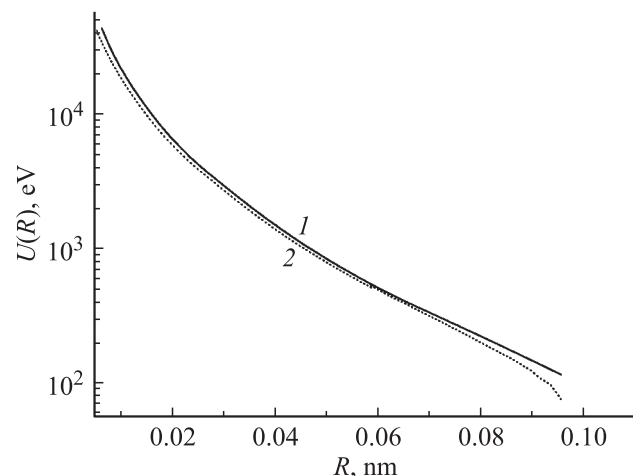
$$R_0 = b \left( 1 - U(R_0)/E_{cm} \right)^{-1/2}. \quad (2)$$

Таким образом, система уравнений (2) позволяет получить функцию  $U(R)$  для интервала межъядерных расстояний  $R$ , соответствующего исследованному диапазону углов рассеяния (или, что то же самое, интервалу параметров удара  $b$ ). Ошибка в абсолютных измерениях сечений приводит к ошибке в калибровке масштаба расстояний для параметра удара  $b$  и соответственно  $R_0$

на 4%. (Ошибка уменьшается в 2 раза из-за корневой зависимости, связывающей  $b$  и фактор, характеризующий абсолютную величину сечений). Ошибки относительных измерений и ошибки в определении углов влияют на ход получаемой кривой. Однако следует отметить, что из-за интегрирования по  $\theta$  при определении функции  $b(\theta)$  происходит известное усреднение данных измерений сечений, и соответственно влияние относительных ошибок уменьшается. Более значимы ошибки, связанные с тем, что поведение сечений известно в ограниченном диапазоне углов. При вычислении функции  $b(\theta)$  приходится аппроксимировать ход сечения в область углов от максимально измеренного до  $180^\circ$ , а при вычислении функции  $U(R_0)$ , в свою очередь, приходится аппроксимировать поведение  $\theta(b)$  при углах, меньших минимального угла диапазона, в котором измерялось сечение. Разумной точности можно добиться, экстраполируя ход сечения в данных областях, согласно теоретической модели потенциала, и потребовав непрерывности зависимости сечения  $d\sigma(\theta)/d\Omega$  от угла.

На рис. 2 показано влияние экстраполяций на получаемые результаты. Использование данных измерений при различных энергиях приводит к расширению интервала углов в приведенных координатах, где сечение известно, что значительно уменьшает ошибки, связанные с экстраполяцией, делая их несущественными в широком диапазоне межъядерных расстояний. На краях диапазона, по нашей оценке, эти ошибки могут составлять до 20%.

Таким образом, ошибки абсолютных измерений сечений влияют только на калибровку масштаба расстояний (ошибка в 4%), а относительный ход кривой  $U(R)$  получается с точностью 1–4% за исключением краев исследованного диапазона, где ошибка не превышает 20%.



**Рис. 2.** Влияние на получаемые из обработки эксперимента значения потенциала экстраполяций сечений за пределы измеренного диапазона углов: 1 — экстраполяция с помощью расчета сечения с использованием потенциала Йенсена, 2 — с помощью расчета с использованием экранированного кулоновского потенциала.

Таблица 1. Потенциалы взаимодействия атомных частиц, полученные из эксперимента

Ar <sup>+</sup> –Ar		Ar <sup>+</sup> –Xe		Cd <sup>+</sup> –Xe		C <sup>+</sup> –Xe		Kr <sup>+</sup> –Xe		Ne <sup>+</sup> –Ne		Ne <sup>+</sup> –Xe		Xe <sup>+</sup> –Xe		Zn <sup>+</sup> –Xe	
R, mm	U, eV	R, mm	U, eV	R, mm	U, eV	R, mm	U, eV	R, mm	U, eV	R, mm	U, eV	R, mm	U, eV	R, mm	U, eV	R, mm	U, eV
0.0063	44200	0.0160	25500	0.0472	3440	0.0111	17500	0.0443	3580	0.0125	5370	0.0110	29150	0.0239	26200	0.0197	24900
0.0073	35500	0.0172	22400	0.0505	2860	0.0119	15660	0.0548	1990	0.0134	4743	0.0118	25680	0.0270	19900	0.0213	21200
0.0080	31300	0.0188	18800	0.0528	2500	0.0132	13020	0.0587	1630	0.0144	4237	0.0127	22770	0.0279	18380	0.0242	16030
0.0088	27100	0.0210	15200	0.0553	2170	0.0146	10880	0.0629	1320	0.0154	3783	0.0164	14260	0.0302	15220	0.0265	13050
0.0101	21900	0.0236	12170	0.0609	1600	0.0160	9320	0.0672	1067	0.0164	3383	0.0179	12010	0.0332	12060	0.0290	10470
0.0110	19100	0.0259	10020	0.0636	1396	0.0172	8180	0.0703	914	0.0178	2942	0.0196	9940	0.0359	9860	0.0332	7460
0.0125	1550	0.0280	8460	0.0653	1277	0.0196	6320	0.0730	803	0.0184	2778	0.0222	7670	0.0391	7920	0.0353	6370
0.0138	13040	0.0309	6720	0.0662	1216	0.0219	5070	0.0797	587	0.0190	2615	0.0237	6630	0.0422	6470	0.0381	5240
0.0148	11590	0.0335	5550	0.0687	1079	0.0240	4180	0.0828	508	0.0196	2471	0.0265	5185	0.0448	5470	0.0406	4370
0.0164	9620	0.0361	4570	0.0716	940	0.0250	3820	0.0876	413	0.0210	2192	0.0303	3822	0.0494	4110	0.0436	3530
0.0182	7860	0.0393	3710	0.0731	875	0.0285	2840	0.0929	332	0.0232	1822	0.0331	3113	0.0555	2830	0.0459	3020
0.0205	6250	0.0430	2930	0.0764	750	0.0317	2220	0.0988	263	0.0239	1714	0.0383	2167	0.0575	2520	0.0499	2320
0.0222	5380	0.0466	2360	0.0788	676	0.0337	1920	0.1031	224	0.0263	1417	0.0410	1817	0.0626	1905	0.0534	1850
0.0243	4510	0.0505	1900	0.0830	561	0.0363	1614	0.1064	198	0.0279	1253	0.0445	1449	0.0654	1653	0.0579	1420
0.0272	3619	0.0554	1450	0.0857	496	0.0399	1285	0.1132	156	0.0296	1107	0.0476	1198	0.0704	1296	0.0611	1186
0.0299	2960	0.0613	1059	0.0894	420	0.0439	1010	0.1195	124	0.0313	976	0.0568	728	0.0737	1115	0.0654	942
0.0331	2360	0.0664	811	0.0912	389	0.0480	800	0.1228	111	0.0336	826	0.0613	580	0.0804	824	0.0694	763
0.0364	1880	0.0738	566	0.0933	352	0.0545	558	0.1259	99.2	0.0347	767	0.0695	397	0.0869	623	0.0719	672
0.0411	1390	0.0804	423	0.0967	302	0.0564	504	0.1300	85.8	0.0381	605	0.0770	283	0.0920	504	0.0775	503
0.0450	1100	0.0876	315	0.1003	256	0.0610	398	0.1336	75.4	0.0413	491	0.0852	194	0.0996	373	0.0831	378
0.0502	819	0.0944	244	0.1046	210	0.0765	197	0.1349	71.2	0.0453	382	0.0928	137	0.1070	281	0.0894	274
0.0549	642	0.1049	168	0.1091	172	0.0879	120.0	0.1372	66.7	0.0480	323	0.1022	90.2	0.1129	227	0.0976	182
0.0603	496	0.1161	113	0.1112	156	0.0931	96.8	0.1446	51.7	0.0503	283	0.1139	56.2	0.1173	195	0.1079	111
0.0676	361	0.1251	81.5	0.1123	149	0.1022	66.1	0.1478	46.4	0.0528	245	0.1218	41.6	0.1224	163	0.1168	73.7
0.0742	278	0.1359	56.4	0.1148	133.5	0.1108	45.6	0.1502	42.9	0.0552	215	0.1345	26.1	0.1267	140	0.1270	47.3
0.0805	215	0.1476	38.7	0.1165	123.5	0.1223	27.3	0.1528	39.4	0.0577	188	0.1404	21.1	0.1294	128	0.1340	35.0
0.0896	147	0.1620	24.6	0.1189	111.5	0.1293	20.1	0.1562	35.2	0.0640	139	0.1456	17.4	0.1352	104	0.1404	26.7
0.0955	114	0.1787	14.2	0.1231	92.4	0.1354	15.7	0.1616	29.2	0.0670	121	0.1484	15.8	0.1386	91	0.1525	16.1

### Полученные результаты и их сопоставление с теоретическими моделями

Полученные потенциалы для систем Ar<sup>+</sup>, C<sup>+</sup>, Cd<sup>+</sup>, Kr<sup>+</sup>, Ne<sup>+</sup>, Xe<sup>+</sup>, Zn<sup>+</sup>–Xe, Ar<sup>+</sup>–Ar и Ne<sup>+</sup>–Ne приведены в табл. 1.

Полученные результаты для систем Ar<sup>+</sup>–Ar и Ne<sup>+</sup>, Ar<sup>+</sup>, Xe<sup>+</sup>–Xe хорошо согласуются с ранее известными данными [9,10,19], а для случаев Ar<sup>+</sup>–Ar и Ne<sup>+</sup>–Ne — с расчетами потенциалов по методу Дирака–Фока–Слэтера [16,17].

Для удобства сопоставления данных для различных систем (рис. 3) использованы координаты  $y = UR/(Z_1 Z_2 e^2)$  (где  $Z_1$  и  $Z_2$  — атомные номера ядер партнеров соударения,  $e$  — заряд электрона) и  $x = R/a_f$ . Длина экранирования  $a_f$  в атомных единицах может быть записана в виде

$$a_f = 0.8853 (Z_1^\alpha + Z_2^\alpha)^{-\beta}. \quad (3)$$

Линхард [20], а затем также Мольер [13] и Йенсен [14] использовали значения параметров  $\alpha = 2/3$  и  $\beta = 0.5$ , тогда как Фирсов [11] предложил использовать значения

$\alpha = 0.5$  и  $\beta = 2/3$ . Бирсак, Циглер и Литлмарк [7] применяли значения  $\alpha = 0.23$  и  $\beta = 1$ . При построении рис. 3 использовались значения  $\alpha$  и  $\beta$ , предложенные Фирсовым.

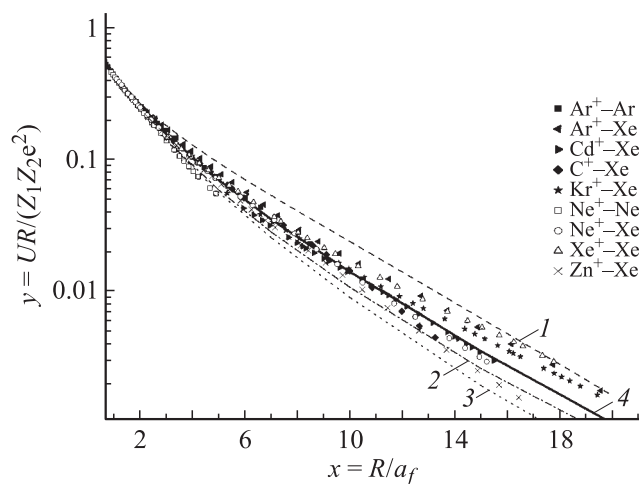


Рис. 3. Зависимость потенциалов взаимодействия для различных систем от межъядерного расстояния в приведенных координатах: 1 — потенциал Мольера, 2 — БЦЛ, 3 — Йенсена, 4 — „средний“ потенциал.

Как видно из рис. 3, полученные данные лежат заметно ниже потенциала Мольера [13] и выше потенциала Йенсена [14]. Несколько лучше согласие с потенциалом БЦП [7]. При этом полученные результаты укладываются на единую кривую и могут быть описаны „средним“ потенциалом независимо от рассматриваемой системы, что позволяет использовать его и для неисследованных случаев.

### Функциональная зависимость „среднего“ потенциала

Для определения функциональной зависимости потенциала от межъядерного расстояния запишем его в следующей форме:

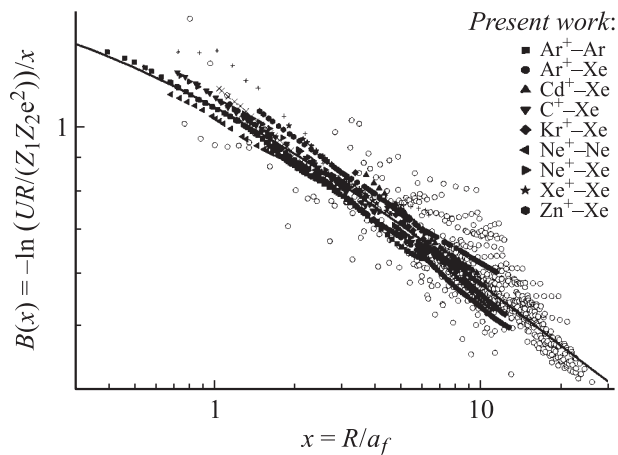
$$U(R) = Z_1 Z_2 e^2 / R \exp\{-B(x)x\}, \quad R = xa_f. \quad (4)$$

Функция экранирования  $B(x)$  может быть определена из данных эксперимента об  $U(R)$ :

$$B(x) = -\ln(UR/(Z_1 Z_2 e^2))/x. \quad (5)$$

На рис. 4 приводятся значения функции  $B(x)$  для полученных потенциалов при различных  $x$ , а также для экспериментальных данных о потенциалах, приведенных в работах [8,10].

Как видно из рис. 4, полученные данные о потенциалах существенно расширяют существовавшую ранее базу данных о потенциалах при  $R < 15a_f$  и характеризуются существенно меньшими ошибками и разбросом данных для различных систем. Данные, собранные в работе [8], характеризуются большим разбросом, что связано с двумя обстоятельствами. Первое — ошибки измерений в работах, выполненных в 1950–1960 гг., были весьма значительны из-за несовершенства техники эксперимента; второе — большинство данных,



**Рис. 4.** Зависимость функции экранирования  $B(x)$  от межъядерного расстояния в приведенных координатах. При вычислении  $a_f$  использованы полученные оптимальные значения  $\alpha = 0.35$  и  $\beta = 0.629$ ; кривая — аппроксимация;  $\circ$  — данные [8]; данные [10] —  $+$  —  $\text{Kr}^+ - \text{Kr}$ ,  $\times$  —  $\text{Ar}^+ - \text{Ar}$ .

**Таблица 2.** Параметры потенциала для аналитического описания исследованных систем

Система	$c_1$	$c_2$	$c_3$	Ошибка для $B_x$ , %	Ошибка для $U(R)$ , %
$\text{Ar}^+ - \text{Ar}$	0.65	0.59	-0.012	0.67	1.33
$\text{Ar}^+ - \text{Xe}$	0.61	0.67	-0.022	0.63	1.86
$\text{Cd}^+ - \text{Xe}$	0.0002	0.95	-0.068	0.48	2.09
$\text{C}^+ - \text{Xe}$	0.326	0.925	-0.092	1.54	3.04
$\text{Kr}^+ - \text{Xe}$	0.186	0.809	-0.036	0.25	1.14
$\text{Ne}^+ - \text{Ne}$	0.610	0.730	-0.112	0.86	1.39
$\text{Ne}^+ - \text{Xe}$	0.505	0.74	-0.052	0.91	1.97
$\text{Xe}^+ - \text{Xe}$	0.565	0.612	-0.004	0.32	1.05
$\text{Zn}^+ - \text{Xe}$	0.497	0.742	-0.058	0.28	1.05

проанализированных в работе [8], было получено при сравнительно невысоких энергиях соударения, т.е. для больших значений приведенного межъядерного расстояния, когда можно ожидать, что приближение „среднего“ потенциала может нарушаться.

Мы провели обработку данных дважды — сначала для данных, полученных нами и данных [10], что позволяет сделать вывод о предпочтительной модели потенциала, опираясь на наиболее точные данные, а затем с включением данных, упомянутых в работе [8], чтобы уточнить поведение „среднего“ потенциала при  $x > 10$ .

Для экранированного кулоновского потенциала в координатах, используемых на рис. 4, функция  $B(x)$  была бы горизонтальной прямой линией. Использование двойного логарифмического масштаба на рис. 4 позволяет сделать вывод о том, что функция  $B(x)$  степенным образом зависит от  $x$ , при этом наклон кривой говорит о том, что ведущий член пропорционален  $x^{-1/2}$ . Имеется и небольшой изгиб зависимости, поэтому предлагается описывать функцию  $B(x)$  степенной зависимостью с тремя параметрами [21]:

$$B(x) = 1 / (c_1 + c_2 x^{1/2} + c_3 x), \quad (6)$$

Среднеквадратичная погрешность описания эксперимента теоретической кривой может быть оценена по формуле [22]:

$$\delta B^2 = (N - k)^{-1} \sum_i \{ [B_i - B(x_i)] / B(x_i) \}^2, \quad (7)$$

где  $N$  — число экспериментальных точек,  $k$  — количество свободных параметров в теории,  $B_i$  — измеренное значение, а  $B(x_i)$  — значение теоретической функции при  $x_i$ . Аналогичным образом можно записать и оценку погрешности для функции  $U(R)$ . Значения параметров  $c_1, c_2, c_3$  находились из условия минимума среднеквадратичной ошибки.

В табл. 2 приведены значения параметров  $c_1, c_2, c_3$  для каждой из исследованных пар, а также среднеквадратичные погрешности описания полученных экспериментальных данных аналитическими функциями  $B(x)$  (6) и

$U(R)$  (4). Обращает на себя внимание тот факт, что предложенная функциональная зависимость для потенциала удивительно хорошо (с точностью 1–3%) описывает полученные экспериментальные данные для конкретных систем. В то же время если ограничиться только двумя параметрами, то точность описания ухудшается в 1.5–2 раза. Таким образом, используя предложенные функциональные зависимости для функций  $B(x)$  (6) и  $U(R)$  (4) и значения параметров  $c_1, c_2, c_3$ , удается с хорошей точностью описать полученные экспериментальные данные для исследованных случаев. Для полученных из эксперимента данных величина ошибки описания эксперимента практически не зависит от выбора параметров  $\alpha$  и  $\beta$ . При определении параметров, приведенных в табл. 2, использовались значения  $\alpha = 0.5$  и  $\beta = 2/3$ , предложенные Фирсовым.

Теперь вернемся к задаче нахождения „среднего“ потенциала, позволяющего описывать всю совокупность имеющихся данных. Учитывая большой разброс данных (см. рис. 4), целесообразно искать минимум ошибки для функции  $B(x)$ . Было бы логично учитывать данные разных работ с весом, обратно пропорциональным квадрату ошибки измерений. Но величину ошибок в более ранних работах оценить весьма трудно, поэтому учитывались данные этих работ весом, равным весу данных настоящей работы и работы [10].

При параметрах  $\alpha = 0.5$  и  $\beta = 2/3$  минимальная ошибка в описании экспериментальных данных для функции  $B(x)$  составляет 9.4%. При варьировании параметров  $\alpha$  и  $\beta$  ошибка заметно уменьшается до 7.16% при оптимальных значениях  $\alpha = 0.35, \beta = 0.629, c_1 = 0.514, c_2 = 0.437, c_3 = -0.016$ .

Ошибка при описании полученных данных о потенциалах с помощью „среднего“ потенциала составляет 17% при  $x < 15$ . Среднеквадратичные ошибки описания тех же данных с помощью потенциалов Мольера, Йенсена и БЦЛ заметно больше: 29, 74 и 29% соответственно. Отметим, что предложенная нами форма записи потенциала позволяет достичь лучшего согласия с экспериментом при меньшем числе подгоночных параметров.

Значение параметра  $c_3$  для „среднего“ потенциала мало, и при  $x = 1–8$  доминирует член, пропорциональный  $x^{-1/2}$ , т.е. происходит переход от экранированного кулоновского потенциала к более сложной зависимости (см. формулы (4), (6)), что, на наш взгляд, обусловлено перестройкой электронных оболочек при соударении атомных частиц.

### Оценка погрешности применения модели „среднего“ потенциала для описания рассеяния

Зависимость ошибок в применении модельного потенциала от межъядерного расстояния ранее не анализировалась. Можно разбить все экспериментальные данные о потенциалах на интервалы по шкале  $x$  и для каждого

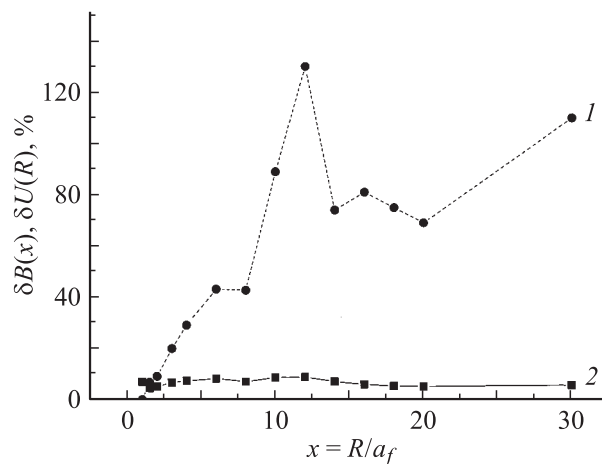


Рис. 5. Относительные ошибки описания эксперимента „средним“ потенциалом для функций  $U(R)$  (—●—) и  $B(x)$  (—■—) в зависимости от рассматриваемого приведенного межъядерного расстояния.

интервала оценить ошибку описания экспериментальных данных предлагаемым модельным „средним“ потенциалом. На рис. 5 приведены оценки среднеквадратичной ошибки для описания эксперимента функциями  $B(x)$  и  $U(x)$  в зависимости от межъядерного расстояния. Видно, что при  $x < 8$  относительные ошибки не превышают соответственно 8.3 и 43%, и можно говорить о хорошей применимости модели „среднего“ потенциала для описания рассеяния частиц. При  $x > 10$  ошибки в описании „средним“ потенциалом эксперимента превышают 50%, и в этом случае целесообразней использовать индивидуальные потенциалы для каждой конкретной пары атомов.

### Выводы

Приведенные данные существенно расширяют базу данных о потенциалах, полученных из эксперимента. Выявленная в настоящей работе зависимость функции  $B(x)$  от  $x^{-1/2}$ , доминирующая при средних  $x = 1–5$ , ранее не была известна, что, на наш взгляд, связано со сложным характером перестройки и взаимодействия электронных оболочек при соударениях атомных частиц.

При расстояниях сближения частиц  $x < 8$  для изученных систем предлагается использовать параметры потенциалов, приведенные в табл. 2. В этом случае точность описания эксперимента будет лучше 5%. В случаях, когда система не изучалась, можно использовать модельный или „средний“ потенциал для описания рассеяния с точностью порядка 10–40%.

При больших межъядерных расстояниях  $x > 10$  применимость модели „среднего“ потенциала нарушается. Параметры для „среднего“ потенциала, приведенные выше, можно использовать только для качественных оценок, а лучше использовать индивидуальные потенциалы для конкретной системы.

Важно также отметить, что при рассматриваемых энергиях соударения происходит возбуждение и ионизация сталкивающихся частиц, и при расчетах необходимо учитывать „неупругость“ рассеяния, например аналогично работе [10]. Следует также учитывать, что все сделанные выводы в основном опираются на экспериментальные данные для систем с  $Z \leq 54$ .

Автор выражает признательность проф. О'Коннору за предоставление собранной им базы данных о потенциалах, полученных из эксперимента.

## Список литературы

- [1] *Torrens I.M.* Interatomic Potentials. N.Y.: Academic, 1972.
- [2] *Парилис Э.С., Тураев Н.Ю., Умаров Ф.Ф., Нижняя С.Л.* Теория рассеяния атомов средних энергий поверхностью твердого тела. Ташкент: ФАН, 1987.
- [3] *Машкова Е.С., Молчанов В.А.* Рассеяние ионов средних энергий поверхностями твердых тел. М.: Атомиздат, 1980.
- [4] *Robinson M.T., Torrens I.M.* // Phys. Rev. B. 1974. Vol. 9. P. 5008.
- [5] *Экштайн В.* Компьютерное моделирование взаимодействия частиц с поверхностью твердого тела. М.: Мир, 1995.
- [6] *Gaydaenko V.I., Nikulin V.K.* // Chem. Phys. Lett. 1970. Vol. 7. P. 360.
- [7] *Ziegler J.F., Biersack J.P., Littmark U.* The Stopping and Range of Ions in Solids. N.Y.: Pergamon Press, 1983. Vol. 1.
- [8] *Connor D.J.O., Biersack J.E.* // Nucl. Instr. & Methods B. 1986. Vol. 15. P. 14.
- [9] *Lane G.H., Everhart E.* // Phys. Rev. 1960. Vol. 120. P. 2064.
- [10] *Афросимов В.В., Гордеев Ю.С., Зиновьев А.Н.* // ЖЭТФ. 1974. Т. 66. С. 1933.
- [11] *Фирсов О.Б.* // ЖЭТФ. 1958. Т. 34. С. 447.
- [12] *Csavinszky P.* // Phys. Rev. 1968. Vol. 66. P. 53.
- [13] *Moliere G.* // Zs. Naturforsch. 1949. Bd 2a. S. 133.
- [14] *Jensen H.Z.* // Phys. B. 1932. Vol. 18. P. 722.
- [15] *Loftager P., Besebbacher F., Jensen O.S., Sorensen V.S.* // Phys. Rev. A. 1979. Vol. 20. P. 1443.
- [16] *Hartung H., Fricke B., Sepp. W.-D., Sengler W., Kolb D.* // J. Phys. B. 1985. Vol. 18. L433.
- [17] *Hartung H., Fricke B., Sepp. W.-D.* et al. // Phys. Lett. 1987. Vol. 119. P. 457.
- [18] *Фирсов О.Б.* // ЖЭТФ. 1957. Т. 33. С. 696.
- [19] *Леонас В.В.* // УФН. 1972. Т. 107. С. 29.
- [20] *Linchard J., Nielsen V., Scharff M.* // K. Danske Vidensk. Selsk. Mat. Fys. Medd. 1986. Vol. 36. N 10.
- [21] *Зиновьев А.Н.* // Изв. РАН. Сер. физ. 2002. Т. 68. С. 362.
- [22] *Худсон Д.* Статистика для физиков. М.: Мир, 1967.