

УДК 539.1.076

ПОТЕНЦИАЛЬНАЯ ЭНЕРГИЯ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ АТОМА С АТОМНОЙ ПЛОСКОСТЬЮ

© 2019 г. В. П. Кошечев^{1, *}, Ю. Н. Штанов²

¹НИУ МАИ, филиал “Стрела”, 140180 Жуковский, Московская область, Россия

²Тюменский индустриальный университет, филиал ТИУ в г. Сургуте, 628400 Сургут, Россия

*E-mail: koshcheev1@yandex.ru

Поступила в редакцию 26.12.2018 г.

После доработки 20.01.2019 г.

Принята к публикации 23.01.2019 г.

Фурье-компонента потенциальной энергии взаимодействия атома и атомной плоскости представлена в виде многочлена четвертой степени от атомного форм-фактора. Численный расчет выполнен в приближении экранированного кулоновского потенциала. Показано, что учет принципа Паули приводит к потенциальному барьеру и дополнительной области притяжения атома и атомной плоскости. Показано, что данная модель удовлетворительно описывает потенциальную энергию взаимодействия атома углерода с листом графена.

Ключевые слова: потенциальная энергия взаимодействия, принцип Паули, атомная плоскость.

DOI: 10.1134/S0207352819080079

ВВЕДЕНИЕ

В работе [1] была исследована проблема применения метода функционала плотности (например, [2]) к задаче вычисления потенциальной энергии взаимодействия атомов и ионов. В статье [3] был предложен альтернативный вариант решения этой задачи, в котором учет принципа Паули приводит к потенциальному барьеру и дополнительной области притяжения двух атомов. Дальнейшее развитие подхода [3] представлено в настоящей работе.

ВЫВОД ВЫРАЖЕНИЯ ДЛЯ ПОТЕНЦИАЛЬНОЙ ЭНЕРГИИ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ

Рассмотрим потенциальную энергию взаимодействия атома с зарядом Z_1e с атомом, заряд которого Z_2e :

$$U = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} + \sum_{j_1=1}^{Z_1} \sum_{j_2=1}^{Z_2} \frac{e^2}{|\mathbf{r}_{1j_1} - \mathbf{r}_{2j_2}|} - \sum_{j_2=1}^{Z_2} \frac{Z_1 e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_{2j_2}|} - \sum_{j_1=1}^{Z_1} \frac{Z_2 e^2}{|\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_{1j_1}|} \quad (1)$$

где \mathbf{r}_1 и \mathbf{r}_2 – векторы, определяющие положение ядер атомов; $\mathbf{r}_{1j_1} = \mathbf{r}_1 + \delta\mathbf{r}_{j_1}$ и $\mathbf{r}_{2j_2} = \mathbf{r}_2 + \delta\mathbf{r}_{j_2}$ – векторы, определяющие положение j_1 -го электрона первого атома и j_2 -го электрона второго атома.

Флуктуации потенциальной энергии взаимодействия (1) вызываются квантовыми флуктуациями, которые испытывают атомные электроны. Усреднение по квантовым флуктуациям местоположения атомных электронов будем осуществлять с помощью метода [4], который Бете использовал для вычисления атомного форм-фактора. Произведем усреднение (1) по квадратам модулей волновых функций атомов. Соответствующие средние будем обозначать $\langle \dots \rangle_{e1}$, $\langle \dots \rangle_{e2}$:

$$\langle U \rangle_{e1, e2} = \int \frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \frac{4\pi e^2}{k^2} (Z_1 - F_1(k)) \times (Z_2 - F_2(k)) \exp(i\mathbf{k}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)), \quad (2)$$

где $U(k) = \frac{4\pi e^2}{k^2} [Z_1 - F_1(k)][Z_2 - F_2(k)]$ – фурье-компонента потенциальной энергии взаимодействия двух атомов; $k = \sqrt{k_x^2 + k_y^2 + k_z^2}$.

Аналогично тому, как это делается в кинетической теории [5], добавим к выражению для Фурье-компоненты потенциальной энергии взаимодействия двух атомов множитель $(1 - F(k)/Z)$, с помощью которого будем учитывать принцип Паули. Величина $F(k)/Z$ является Фурье-компонентой плотности распределения атомных электронов, которая нормирована на единицу. Ожидается, что сомножитель $(1 - F(k)/Z)$ будет действовать аналогично функции распределения

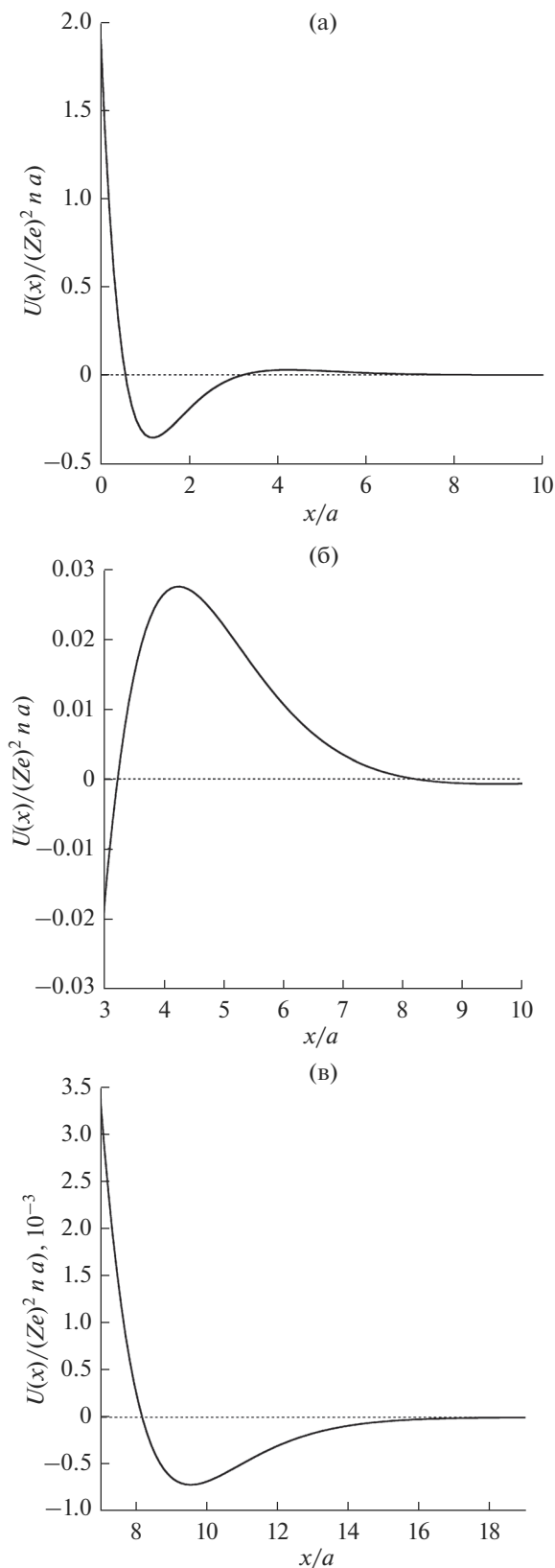


Рис. 1. Потенциальная энергия взаимодействия атома с атомной плоскостью в различных масштабах: а – $x/a \in [0; 10]$, б – $x/a \in [3; 10]$, в – $x/a \in [7; 19]$.

Ферми–Дирака, с помощью которой учитывают принцип Паули в системах частиц с полуцелым спином [4]. В работе [3] принцип Паули был учтен для обоих атомов с помощью двух дополнительных сомножителей:

$$U(k) = \frac{4\pi Z_1 Z_2 e^2}{k^2} [1 - F_1(k)/Z_1]^2 \times [1 - F_2(k)/Z_2]^2. \quad (3)$$

Численный расчет выполним для случая $Z_1 = Z_2 = Z$.

Атомный форм-фактор выберем в приближении экранированного кулоновского потенциала:

$$F(k) = Z\mu^2 / (\mu^2 + k^2), \quad (4)$$

где $\mu = 1/a$; a – радиус экранирования Томаса–Ферми [4].

Потенциальная энергия взаимодействия атома с атомной плоскостью кристалла имеет вид:

$$U(x) = n \int_{-\infty}^{\infty} U(k_x) \exp(ik_x x) \frac{dk_x}{2\pi}, \quad (5)$$

где n – поверхностная плотность атомов.

С помощью теории вычетов [6] по формулам (3) и (4) вычислим интеграл (5) получим:

$$U(x) = \frac{2i\pi n (Ze)^2}{3} \lim_{k_x \rightarrow i\mu} \frac{d^3}{dk_x^3} \times \left(\frac{k_x^6}{(k_x + i\mu)^4} \exp(ik_x x) \right), \quad (6)$$

где $i = \sqrt{-1}$.

Результат вычисления по формуле (6) запишется как

$$U(x) = \frac{\pi (Ze)^2 n}{24\mu} [-\mu^3 x^3 + 12\mu^2 x^2 - 33\mu x + 15] \exp(-\mu x). \quad (7)$$

РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

На рис. 1а представлен график потенциальной энергии взаимодействия атома с атомной плоскостью. Видно, что учет принципа Паули приводит как к потенциальному барьеру (рис. 1б), так и к дополнительной области притяжения (рис. 1в) атома и атомной плоскости. На рис. 2 показано сравнение результатов расчета по формуле (7) с данными, которые были получены в работе [7]. Для атомов углерода в графене длина экранирования составляет: $\mu^{-1} = a = 0.258 \text{ \AA}$, $((Ze)^2/a) \approx 2.011 \text{ кэВ}$, $n = 4/(3\sqrt{3}a_0^2)$, $a_0 = 1.42 \text{ \AA}$. Длина экранирования является единственным варьируемым

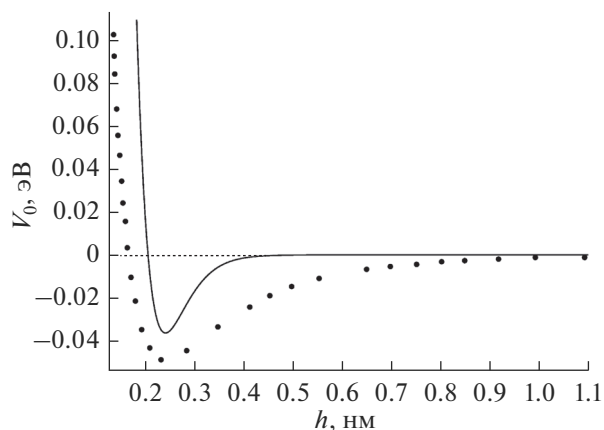


Рис. 2. Зависимость потенциала взаимодействия углерода с подложкой от его удаленности от плоской подложки, образованной листом графена. Темные точки – результат работы [7], черная линия – результат расчета $U(x)$ по формуле (7).

параметром в формуле (7). Было принято, что $a = a_{T-F} = 0.885a_0Z^{-1/3} = 0.258 \text{ \AA}$, $a_0 = 0.529 \text{ \AA}$. Используя (рис. 1б), можно оценить высоту потенциального барьера, которая препятствует сближению атома углерода с листом графена $U(x = 4.255a) = 1.403 \text{ эВ}$. Видно, что данная модель удовлетворительно описывает потенциальную энергию взаимодействия атома углерода с листом графена.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе представлены первые результаты нового метода расчета потенциальной энергии взаимодействия атома с атомной плоскостью в непрерывном приближении. Продемонстрировано удовлетворительное согласие с результатами ра-

боты [7]. С другой стороны, в работе [3] было показано, что новый метод расчета потенциальной энергии взаимодействия двух изолированных атомов кремния приводит к результату, который значительно меньше парной энергии взаимодействия двух атомов кремния по данным работы [8]. Следует ожидать [3], что более реалистические модели электронной плотности (например, [9–11]) позволят получить количественное согласие нового подхода к вычислению потенциальной энергии взаимодействия двух атомов с результатами расчета с помощью теории функционала плотности, но не нарушат удовлетворительное согласие с результатами работы [7], которое было достигнуто в настоящей работе.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Medvedev M.G. et al.* // Science. 2017. V. 355. № 6320. P. 49. <https://doi.org/10.1126/science.aah5975>
2. *Сарры А.М., Сарры М.Ф.* // ФТТ. 2012. Т. 54. № 6. С. 1237.
3. *Кощев В.П., Штанов Ю.Н.* // Письма в ЖТФ. 2018. Т. 44. № 13. С. 28.
4. *Бете Г.* Квантовая механика. М.: Мир, 1965. 333 с.
5. *Лифшиц Е.М., Питаевский Л.П.* Физическая кинетика. М.: Наука, 1979. 528 с.
6. *Свешников А.Г., Тихонов А.Н.* Теория функций комплексной переменной. М.: Наука, 1974. 319 с.
7. *Савин А.В., Мазо М.А.* // ФТТ. 2017. Т.59. № 6. С. 1234.
8. *Заводинский В.Г., Горкуша О.А.* // ФТТ. 2014. Т. 56. В. 11. С. 2253.
9. *Molière G.* // Zeitschrift Naturforsch. Tl. A. 1947. V. 2. P. 133.
10. *Doyle P.A. Turner P.S.* // Acta Crystallogr., Sect. A. 1968. V. 24. P. 390.
11. *Kirkland E.J.* Advanced computing in electron microscopy. Springer Science & Business Media, 2010. 293 p.

Potential Energy of Interaction of Atom with the Atomic Plane

V. P. Koshcheev, Yu. N. Shtanov

The Fourier component of the potential energy of the interaction of an atom and an atomic plane is represented as a polynomial of the fourth degree from the atomic form factor. The numerical calculation is performed in the approximation of the screened Coulomb potential. It is shown that taking into account the Pauli principle leads to a potential barrier and an additional region of attraction of the atom and the atomic plane. It is shown that this model satisfactorily describes the potential energy of interaction of a carbon atom with a graphene sheet.

Keywords: potential energy of interaction, Pauli principle, atomic plane.