

УДК 537.534.9

## ЯДЕРНЫЕ ТОРМОЗНЫЕ СПОСОБНОСТИ ДЛЯ DFT-ПОТЕНЦИАЛОВ С ПРИТЯГИВАЮЩЕЙ ЯМОЙ

© 2023 г. П. Ю. Бабенко<sup>а</sup>, А. Н. Зиновьев<sup>а, \*</sup>

<sup>а</sup>Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, 194021 Россия

\*e-mail: zinoviev@inprof.ioffe.ru

Поступила в редакцию 22.01.2023 г.

После доработки 15.03.2023 г.

Принята к публикации 15.03.2023 г.

С использованием потенциалов взаимодействия, полученных в рамках теории функционала плотности, рассчитаны ядерные тормозные способности для систем H, D, T–Be, C, W, необходимые для расчета взаимодействия плазма–стенка в термоядерных исследованиях, а также для систем Kг–Si, Kг–Ge, O–Si, применяемых при ионной имплантации в полупроводники. В диапазоне значений энергии столкновения 10–1000 эВ полученные данные отличаются от данных SRIM на 15–70%. Наличие потенциальной ямы приводит к появлению дополнительного пика на зависимости сечения ядерного торможения при низких энергиях. Сравнение классических расчетов транспортного сечения с квазиклассическими показало их идентичность при энергии до 0.3 эВ.

**Ключевые слова:** ядерная тормозная способность, межатомные потенциалы, квазиклассическое приближение, транспортное сечение, материалы для токамаков-реакторов, ионная имплантация.

**DOI:** 10.31857/S1028096023110055, **EDN:** LXSTNO

### ВВЕДЕНИЕ

Для описания торможения частиц в веществе используется подход, развитый в [1], в котором различают потери энергии, связанные с упругим рассеянием налетающей частицы на атомных ядрах мишени, и электронными тормозными способностями, связанными с возбуждением и ионизацией электронной системы.

В настоящее время под эгидой МАГАТЭ (Международного агентства по атомной энергии) ведутся работы по уточнению тормозной способности атомов и ионов в твердых телах [2]. Основное внимание уделяют измерению электронной тормозной способности. При высоких энергиях вклад электронных тормозных потерь доминирует. Однако при более низких энергиях основной вклад в торможение частиц вносят ядерные тормозные способности. Например, в системе Ag–Si ядерные тормозные потери превышают электронные при энергиях менее 100 кэВ. При столкновениях изотопов водорода с материалами первой стенки токамака реактора (Be, W) ядерные тормозные потери существенны при энергии частиц менее 1 кэВ, что характерно для пристеночной плазмы.

Для создания более тонких слоев имплантируемого материала при ионной имплантации требуется снижение энергии бомбардирующих частиц.

Большое значение имеет образование дефектов кристаллической структуры, связанных в основном с упругими столкновениями частиц (ядерными тормозными потерями).

В [3] были проанализированы данные о потенциалах, полученных путем обработки измерений рассеяния частиц, и предложен потенциал, наилучшим образом соответствующий экспериментальным данным. В [4] экспериментальные данные о потенциалах сравнивали с расчетами в приближении функционала плотности (DFT), и было достигнуто хорошее согласие с экспериментом (далее будем называть эти потенциалы DFT-потенциалами).

Данных об экспериментальном определении ядерных тормозных способностей мало. Ядерные потери трудно измерять, как указано в [5]. В [6–8] измеряли полные потери энергии частицами, а вклад ядерного торможения оценивали путем расчетов с использованием кода SRIM, который вносит заметные погрешности. В [9, 10] рассматривали различные методы расчета ядерных тормозных потерь и их влияние на моделирование распределения по глубине атомов, внедренных с помощью ионной имплантации, а также на анализ данных о проективных пробегах атомов в твердых телах. Сечения ядерного торможения и транспортные сечения связаны между собой про-

стой формулой. В [11, 12] были рассчитаны транспортные сечения для систем, интересных для исследования плазмы.

Целью работы было вычисление ядерного торможения с использованием модифицированных потенциалов DFT для различных систем сталкивающихся атомов. Элементы-мишени были выбраны с учетом интересов термоядерных исследований, а также популярных мишеней для ионной имплантации. В качестве бомбардирующих частиц были выбраны изотопы водорода, инертные газы, углерод, азот и кислород. Выбор систем также зависел от наличия спектроскопических данных о потенциальной яме, что было необходимо для уточнения DFT-потенциала.

Для легких атомов с энергией менее 100 эВ классические расчеты дополнены расчетами в квазиклассическом приближении.

### МЕТОДИКА РАСЧЕТА

Сечение ядерного торможения выражается формулой [13]:

$$S_n = \frac{dE}{dRN} = \int_0^\infty 2\pi b T[\theta(b)] db, \quad (1)$$

где  $N$  – плотность мишени. Потеря энергии при соударении  $T[\theta]$  дается формулой:

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

здесь  $M_1$  и  $M_2$  – массы сталкивающихся частиц,  $\theta(b)$  – угол рассеяния в системе центра масс при параметре удара  $b$ ,  $E$  – энергия налетающей частицы.

Таким образом,

$$S_n = 4 \frac{M_1M_2}{(M_1 + M_2)^2} E \int_0^\infty 2\pi \sin^2 \left[ \frac{\theta(b)}{2} \right] b db. \quad (3)$$

Отметим, что основной вклад в значение интеграла дают углы  $\theta \sim 1$ .

Транспортное сечение связано с сечением рассеяния на угол  $\theta$  соотношением [14]:

$$Q_{tr} = \int_0^\infty (1 - \cos\theta) d\sigma = 2 \int_0^\infty 2\pi \sin^2 \left[ \frac{\theta(b)}{2} \right] b db. \quad (4)$$

Отсюда сечение ядерного торможения  $S_n$  выражается через транспортное сечение  $Q_{tr}$  следующим образом:

$$S_n = Q_{tr} \frac{2M_1M_2}{(M_1 + M_2)^2} E. \quad (5)$$

В классической механике сечение рассеяния рассчитывают через зависимость угла рассеяния

от параметра удара при использовании конкретного потенциала взаимодействия. В квазиклассическом приближении понятие траектории отсутствует.

Для расчета транспортного сечения в квазиклассическом приближении обычно применяют формулу из [15]:

$$Q_{tr} = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (l+1) \sin^2(\delta_l - \delta_{l+1}), \quad (6)$$

здесь  $k = p/\hbar$  – волновой вектор,  $p$  – импульс в системе центра масс (смс),  $l$  – орбитальное квантовое число,  $\delta_l$  – фаза рассеяния.

Фаза  $\delta_l$  в квазиклассическом приближении определяется выражением [14]:

$$\delta_l = \int_{r_0}^{\infty} \left[ \sqrt{2\mu [E_{\text{смс}} - U(r)] - \frac{\left(l + \frac{1}{2}\right)^2}{r^2} - k} \right] dr + \frac{\pi}{2} \left( l + \frac{1}{2} \right) - kr_0, \quad (7)$$

где  $r$  – межъядерное расстояние,  $\mu$  – приведенная масса ( $\mu = M_1M_2/(M_1 + M_2)$ ),  $E_{\text{смс}}$  – энергия в системе центра масс,  $U$  – потенциал межатомного взаимодействия. Здесь  $r_0$  – корень уравнения

$$2\mu [E_{\text{смс}} - U(r_0)] - \frac{\left(l + \frac{1}{2}\right)^2}{r_0^2} = 0. \quad (8)$$

Как видно, в подынтегральном выражении в формуле (7) вычитаются два больших члена. Чтобы увеличить точность вычислений, мы преобразовали выражение для фазы, умножив числитель и знаменатель на сопряженное выражение, а также сделали замену переменной в интеграле:

$$\delta_l(r_0, l) = \int_{\frac{r_0}{R_{up}}}^1 \frac{\left[ -2\mu U\left(\frac{r_0}{t}\right) - \frac{\left(l + \frac{1}{2}\right)^2}{\left(\frac{r_0}{t}\right)^2} \right] \left(\frac{r_0}{t}\right)}{\sqrt{k^2 - 2\mu U\left(\frac{r_0}{t}\right) - \frac{\left(l + \frac{1}{2}\right)^2}{\left(\frac{r_0}{t}\right)^2} + k}} dt + \frac{\pi}{2} \left( l + \frac{1}{2} \right) - kr_0. \quad (9)$$

При вычислении интеграла (7)  $r$  меняется от  $r_0$  до  $\infty$ .  $R_{up}$  – максимальное значение  $r$ , до которого ведется интегрирование. Величину  $R_{up}$  выбирали достаточно большой, чтобы не влиять на результаты расчета. По такому же критерию выбирали максимальное число  $l$  в сумме при вычислении транспортного сечения.

Из приведенных формул видно, что при расчетах как классических траекторий, так и фазы определяющее значение имеет выбор потенциала для адекватного описания системы взаимодействующих частиц.

Применимость квазиклассического рассмотрения задачи сводится к условию:

$$\frac{1}{2\pi} \left| \frac{d\lambda}{dx} \right| \ll 1, \quad (10)$$

где  $\lambda(x) = 2\pi h/p(x)$  – дебройлевская длина волны частицы,  $x$  – координата частицы. Таким образом, длина волны частицы должна мало меняться на расстояниях, характерных для изменения потенциала. В рассматриваемом случае это расстояние совпадает с размером потенциальной ямы  $a \sim 1 \text{ \AA}$ . Критерий  $\lambda/2\pi < 0.1a$  выполняется для атома водорода вплоть до энергии  $E > 0.3 \text{ эВ}$ .

Если вернуться к критерию применимости квазиклассических расчетов для вычисления транспортного сечения или ядерного торможения, то обычный критерий применимости классики для описания рассеяния  $\theta l \gg 1$  в случае расчета транспортного сечения или ядерного торможения сводится к более простому условию  $l \gg 1$ , так как основной вклад в сечение ядерного торможения вносят углы  $\theta \sim 1$ . В рассматриваемом примере при энергии  $0.3 \text{ эВ}$  и  $a = 1 \text{ \AA}$   $l = 12$ , т.е. критерии (10) и  $l \gg 1$  выполняются.

### DFT-ПОТЕНЦИАЛЫ

В рамках приближения функционала плотности потенциал взаимодействия частиц рассчитывают как разность энергии системы атомов при фиксированном межъядерном расстоянии и энергии системы в пределе разделенных атомов. Отличие разных методов расчета состоит в выборе расширенного базиса волновых функций. В [16, 17] для выбора базиса использовали пакет программ DMol [17]. Подробное описание методики выбора базиса можно найти в [16, 17]. Как уже упоминалось, расчет в приближении функционала плотности с использованием базиса DMol дает хорошее согласие с экспериментом по рассеянию атомных частиц в газовой фазе [4]. Значения потенциалов для систем Ag–Al, Ag, Ag, Xe; Kr–C, N, Ne, Al, Si, Ar, Ge, Kr, Xe; Ne–Ne, Xe; Xe–C, N, Zn, Xe были опубликованы ранее в [4], а для систем D и He–Be, C, W – в [18], для систем Be–Be; C–C, N, O, Al, Fe; N–N, O, Al; O–Be, O, Al, Si, Fe; W–W – в [19]. Проведенный анализ различных систем, где имеются экспериментальные данные, показал, что среднеквадратичное отклонение полученных значений DFT-потенциала от эксперимента в области энергии 15–100 эВ составляет 11%.

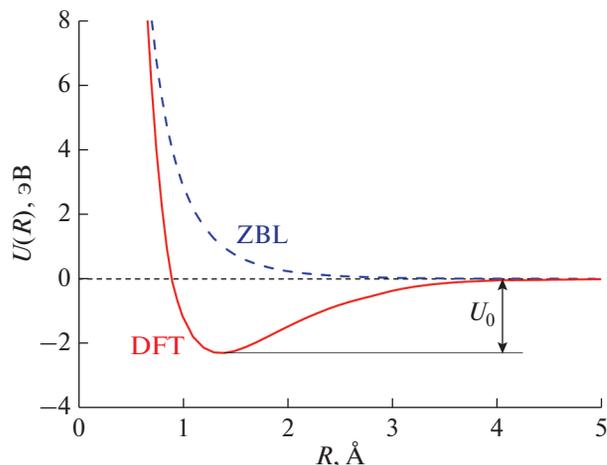


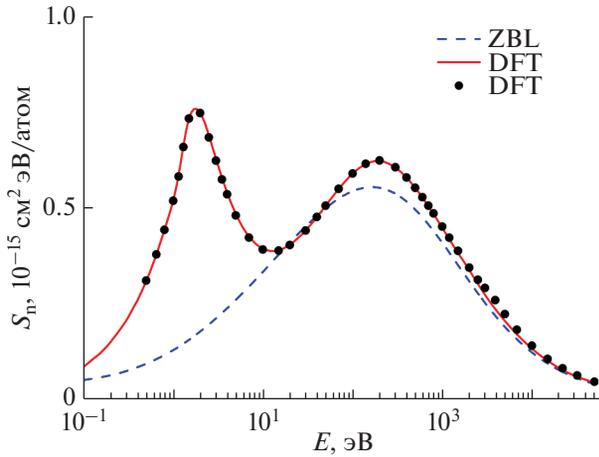
Рис. 1. Потенциалы межъядерного взаимодействия DFT и ZBL для системы H–Be в зависимости от межъядерного расстояния.

В случаях, когда в потенциале имеется яма, возможно сопоставление параметров потенциальной ямы, полученной в расчете, со спектроскопическими данными [20–24]. Проведенный анализ показал, что расчеты методом DFT дают достаточно точное положение минимума потенциальной ямы (равновесное расстояние). Глубина потенциальной ямы различна. Для уточнения поведения потенциала вблизи потенциальной ямы использовали следующую процедуру: зависимость поведения потенциала от межъядерного расстояния брали из расчета и проводили нормирование на экспериментальные значения глубины потенциальной ямы.

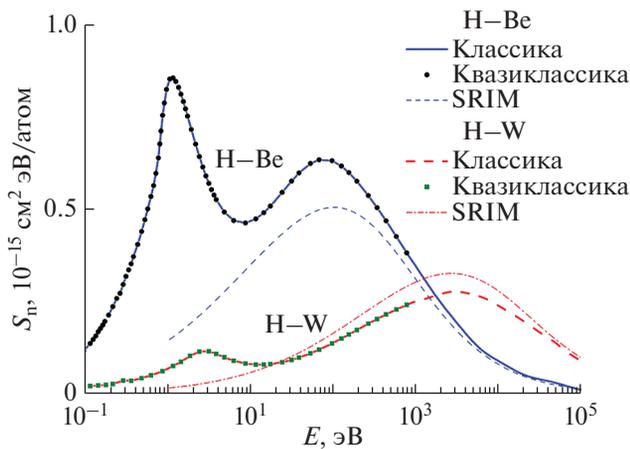
На рис. 1 представлена зависимость потенциала межъядерного взаимодействия от межъядерного расстояния для пары H–Be. Приведены потенциалы Зиглера–Бирзака–Литмарка (ZBL) и DFT. Из рис. 1 видно, что при расчете потенциала методом функционала плотности на зависимости  $U=f(R)$  присутствует притягивающая яма. Расчет DFT дает глубину ямы  $U_0 = 3.07 \text{ эВ}$ . В настоящих расчетах использовали потенциал DFT, в котором глубина ямы поправлена на спектроскопические данные об энергии диссоциации  $E_D = U_0 = 2.3 \text{ эВ}$ . Таким образом, DFT-потенциал заметно отличается от чисто отталкивательного потенциала ZBL [25], используемого в программе SRIM [26].

### РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТА

Результаты расчетов ядерных тормозных потерь в классическом и квазиклассическом приближении для систем H–C и H–Be, H–W приведены на рис. 2 и 3. Расчеты в классическом и квазиклассическом



**Рис. 2.** Сечение ядерного торможения в зависимости от энергии налетающей частицы в случае H–C: результаты расчета с использованием потенциалов DFT и ZBL в классическом приближении (линии) и для потенциала DFT в квазиклассическом приближении (точки).



**Рис. 3.** Сечение ядерного торможения в случаях систем H–Be и H–W: результаты расчетов для потенциала DFT в классическом и квазиклассическом приближениях, а также потенциала ZBL с использованием кода SRIM.

ском приближениях хорошо согласуются между собой. Обычно квазиклассическое приближение учитывает интерференционные эффекты и дает более точные результаты, чем расчеты с помощью классической механики. В рассматриваемом случае, по-видимому, совпадение результатов говорит о том, что при вычислении ядерных тормозных потерь можно пользоваться более простым способом вычисления, используя выражения классической механики вплоть до энергии 0.3 эВ.

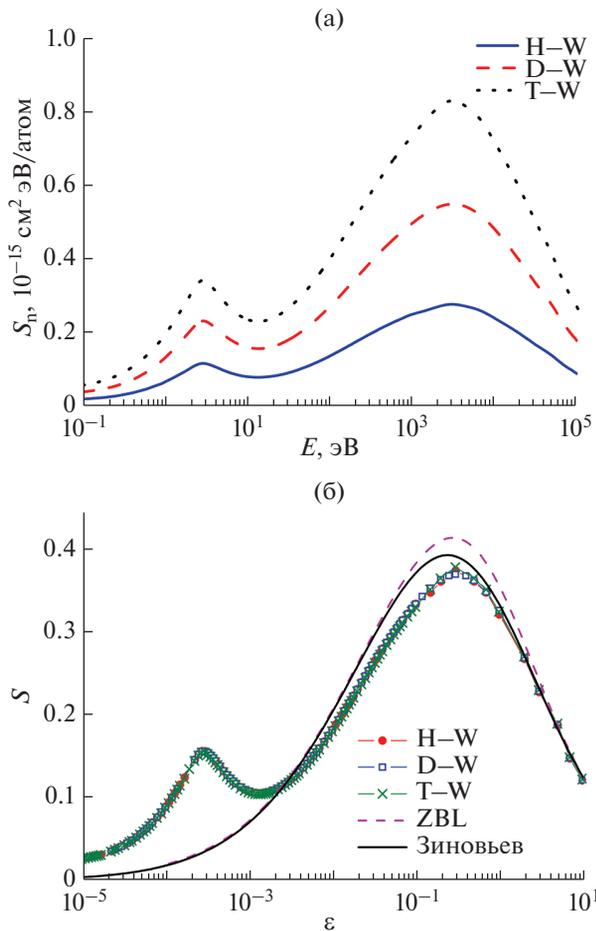
Для всех систем с потенциальной ямой на зависимости сечения ядерного торможения наблю-

дается дополнительный пик при небольшой энергии соударения (рис. 2, 3). Видно, что при наличии ямы в потенциале взаимодействия на зависимости сечения ядерного торможения появляется максимум. То есть использование универсального потенциала ZBL может приводить к существенным ошибкам в определении тормозных способностей частиц. Различие ядерных тормозных потерь для потенциалов DFT и ZBL при энергии выше 10 эВ составляет 17–70%. Наличие дополнительного максимума при меньшей энергии увеличивает это различие. При расчете тормозных потерь частиц в пристеночной плазме токамака-реактора подобное различие необходимо обязательно учитывать.

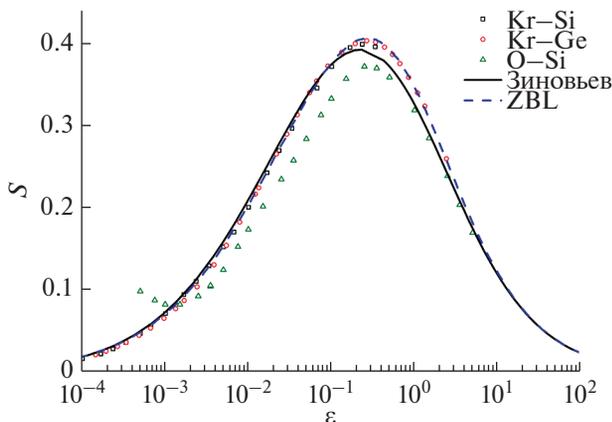
На рис. 4а представлены расчеты ядерных тормозных потерь в случае столкновений различных изотопов водорода с вольфрамом. Как показано в [27], потенциалы взаимодействия для различных изотопов водорода практически совпадают. Это позволяет пересчитать транспортное сечение и сечение ядерного торможения для этих случаев простой перенормировкой. На рис. 4б представлены те же сечения в приведенных координатах  $\epsilon = E/\epsilon_0$  и  $S = S_0/S_0$ , где  $\epsilon_0 = (Z_1 Z_2 e^2/a)(M_1 + M_2)/M_2$ ,  $S_0 = \pi a^2 \epsilon_0 4 M_1 M_2 / (M_1 + M_2)^2$ , предложенных в [1]. Выбор длины экранирования  $a$  зависит от типа потенциала. В рассматриваемом случае применяется длина экранирования Фирсова [28], выраженная в атомных единицах,  $a = 0.8853 / (Z_1^{1/2} + Z_2^{1/2})^{2/3}$ . Здесь  $Z_1$  и  $Z_2$  – заряды ядер сталкивающихся частиц. Как видно из рис. 4б, данные для разных изотопов описываются универсальной кривой. Аналогично можно пересчитать данные для разных изотопов и для систем с Be и C.

Для сравнения также приведен расчет потенциалом Зиновьева [3] и ZBL [25]. Расчет с использованием потенциала Зиновьева при энергии более 10 эВ близок к расчету с использованием потенциала DFT. Кривая, полученная для потенциала ZBL, отличается больше.

На рис. 5 приведены данные расчета сечений ядерного торможения для систем Kг–Si, Kг–Ge, O–Si, т.е. для случая имплантации ионов в полупроводники. Также приведен расчет для системы Kг–Si с использованием потенциалов ZBL [25] и Зиновьева [3]. Из рис. 5 видно, что в универсальных координатах сечения ядерного торможения криптона в кремнии и германии практически совпадают и хорошо описываются расчетом с помощью потенциалов Зиновьева и ZBL. Это неудивительно, так как в этих системах практически отсутствует потенциальная яма. Наличие потенциальной ямы в системе O–Si приводит к отклонению от универсальной зависимости. Данные расчета при энергии выше максимума лучше



**Рис. 4.** Сечения ядерного торможения в зависимости от энергии налетающей частицы в случае столкновений изотопов водорода с мишенью из вольфрама с использованием потенциала DFT в обычных (а) и универсальных координатах [1] (б). Также приведены результаты расчета с использованием потенциалов ZBL и Зиновьева (б).



**Рис. 5.** Сечение ядерного торможения в зависимости от энергии налетающей частицы в универсальных координатах [1]: результаты расчета для систем Kr–Si, Kr–Ge, O–Si с использованием потенциала DFT и для системы Kr–Si с использованием потенциалов ZBL и Зиновьева.

согласуются с расчетом при использовании потенциала Зиновьева.

**ЗАКЛЮЧЕНИЕ**

С использованием потенциалов, полученных в приближении функционала плотности, рассчитаны ядерные тормозные способности в диапазоне энергии соударения 10 эВ–100 кэВ для систем H, D, T–Be, C, W, необходимые для расчета взаимодействия плазма–стенка в термоядерных исследованиях, а также для систем Kr–Si, Kr–Ge, O–Si, используемых при ионной имплантации. Проведено сопоставление с данными, получаемыми при применении универсальных моделей потенциала, и охарактеризована их точность.

Показано, что наличие притягивающей ямы в потенциале приводит к дополнительному пику на зависимости сечения ядерного торможения при малых энергиях.

Продемонстрирована идентичность результатов расчетов с использованием понятия траектории частиц и расчетов в квазиклассическом приближении. Для расчетов транспортного сечения и сечения ядерного торможения критерий применимости квазиклассики упрощается и сводится к условию  $l \gg 1$ .

**Конфликт интересов.** Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

**СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ**

1. Lindhard J., Scharff M., Schiott H.E. // Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk. 1963. V. 33. P. 1.
2. Improvement of the Reliability and Accuracy of Heavy Ion Beam Analysis. Technical Reports Series. № 485 / Ed. A. Simon. Vienna: IAEA, 2019. 198 p.
3. Zinoviev A.N. // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B. 2011. V. 269. P. 829. <https://doi.org/10.1016/j.nimb.2010.11.074>
4. Zinoviev A.N., Nordlund K. // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B. 2017. V. 406. P. 511. <https://doi.org/10.1016/j.nimb.2017.03.047>
5. Naqvi S.R., Possnert G., Primetzhofer D. // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B. 2016. V. 371. P. 76. <https://doi.org/10.1016/j.nimb.2015.09.048>
6. Grahmann H., Kalbitzer S. // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. 1976. V. 132. P. 119. [https://doi.org/10.1016/0029-554X\(76\)90720-5](https://doi.org/10.1016/0029-554X(76)90720-5)
7. Jedrejic D., Greife U. // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B. 2018. V. 428. P. 1. <https://doi.org/10.1016/j.nimb.2018.04.039>
8. Shnidman R., Tapphorn R.M., Geller K.N. // Appl. Phys. Lett. 1973. V. 22. P. 551. <https://doi.org/10.1063/1.1654504>
9. Glazov L.G., Sigmund P. // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B. 2003. V. 207. P. 240. [https://doi.org/10.1016/S0168-583X\(03\)00461-0](https://doi.org/10.1016/S0168-583X(03)00461-0)

10. *Krist Th., Mertens P., Biersack J.P.* // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B. 1984. V. 2. P. 177.  
[https://doi.org/10.1016/0168-583X\(84\)90183-6](https://doi.org/10.1016/0168-583X(84)90183-6)
11. *Krstic P.S., Schultz D.R.* // Phys. Plasmas. 2006. V. 13. P. 053501.  
<https://doi.org/10.1063/1.2199808>
12. *Schultz D.R., Krstic P.S.* // Phys. Plasmas. 2002. V. 9. P. 64.  
<https://doi.org/10.1063/1.1419056>
13. *Руссел Х., Рузе И.* Ионная имплантация. М.: Наука, 1983. 359 с.
14. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Квантовая механика. М.: Наука, 1989. 767 с.
15. *Мотт Н., Мессу Г.* Теория атомных столкновений. М.: Мир, 1969. 756 с.
16. *Zinoviev A.N.* // Tech. Phys. 2008. V. 53. P. 13.  
<https://doi.org/10.1134/S1063784208010039>
17. DMol Software, 1997 Version. DMol is a Trademark of AccelRys. Inc.
18. *Meluzova D.S., Babenko P.Yu., Shergin A.P., Nordlund K., Zinoviev A.N.* // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B. 2019. V. 460. P. 4.  
<https://doi.org/10.1016/j.nimb.2019.03.037>
19. *Zinoviev A.N., Babenko P.Yu., Nordlund K.* // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B. 2021. V. 508. P. 10.  
<https://doi.org/10.1016/j.nimb.2021.10.001>
20. *Luo Y.R.* Comprehensive Handbook of Chemical Bond Energies. Boca Raton: CRC Press, 2007. 1688 p.  
<https://doi.org/10.1201/9781420007282>
21. *Darwent B.* Bond Dissociation Energies in Simple Molecules. NSRDS-NBS. 31. 1970.
22. *Радциг А.А., Смирнов Б.М.* Справочник по атомной и молекулярной физике. М.: Атомиздат, 1980. 240 с.
23. *Никольский Б.П.* Справочник химика. Т. 1. Л.: Химия, 1966. 1072 с.
24. NIST Data Base. <https://webbook.nist.gov/chemistry/>
25. *Ziegler J.F., Biersack J.P., Littmark U.* The Stopping and Range of Ions in Solids, The Stopping and Range of Ions in Matter. V. 1. New York: Pergamon, 1985. 321p.
26. *Ziegler J.F., Biersack J.P.* SRIM. <http://www.srim.org>
27. *Бабенко П.Ю., Зиновьев А.Н.* // ЖТФ. 2021. Т. 91. С. 1901.  
<https://doi.org/10.21883/JTF.2021.12.51754.199-21>
28. *Firsov O.B.* // Sov. Phys. JETP. 1958. V. 7. P. 308.

## Nuclear Stopping for DFT Potentials with Attraction Well

P. Yu. Babenko<sup>1</sup> and A. N. Zinoviev<sup>1, \*</sup>

<sup>1</sup>*Ioffe Institute, St. Petersburg, 194021 Russia*

*\*e-mail: zinoviev@inprof.ioffe.ru*

Using the interaction potentials obtained in the framework of the density functional theory, the nuclear stopping powers are calculated for the H, D, T–Be, C, W, systems necessary for calculating the plasma–wall interaction in thermonuclear research, as well as for the Kr–Si, Kr–Ge, O–Si systems, used in ion implantation into semiconductors. In the collision energy range 10–1000 eV, the obtained data differ from the SRIM data by 15–70%. The presence of a potential well leads to the appearance of an additional peak in the nuclear stopping power at low energies. A comparison of the classical calculations of the transport cross section with the semiclassical ones showed their identity at energies up to 0.3 eV.

**Keywords:** nuclear stopping power, interatomic potentials, semiclassical approximation, transport cross section, materials for tokamak reactors, ion implantation.