

行政院國家科學委員會專題研究計畫成果報告

固體對低速投射原子之電子阻擋本領

計畫編號：NSC 89-2215-E-009-092

執行期間：89年8月1日至90年7月31日

計畫主持人：桂正楣

處理方式：可立即對外提供參考

執行單位：國立交通大學電子工程學系

中華民國：九十年九月一日

固體對低速投射原子之電子阻擋本領

The Electronic Stopping Power of Solids for Slow Projectile Atoms

計劃編號：NCS 89-2215-E-009-092

執行期間：89/08/01-90/07/31

主持人：桂正楣 交通大學電子工程系教授

中文摘要（關鍵詞：阻擋本領）

本研究根據介電理論，探討固體對低速投射原子之電子阻擋本領。在我們的計算中，利用了含電子關連及交換效應之區域場修正介電函數。針對固體內傳導電子對低速原子電荷分佈之屏蔽效應，我們採用了湯姆斯-費米的屏蔽模式。而原子電荷分佈則分電子軌域來考量，各層電子密度則用多個湯川位能疊加導出。我們針對原子數為六至十八之原子，計算了鋁、鎳、銀及金之阻擋本能。計算之結果發現阻擋本領隨原子序振盪之現象，正如實驗數據所顯示。由本研究結果和其他理論比較，可明顯看出，我們的理論優於其他的理論。

英文摘要（keyword：stopping power）

Based on the dielectric response theory, electronic stopping powers of solids for slow atoms have been studied. Using a local-field-correction dielectric function, we have calculated these stopping powers by including the correlation and exchange effects. The screening of shellwise electron charge densities of slow atoms by the conduction electrons in solids was estimated using a Thomas-Fermi screening model. In this model, atomic shellwise electron densities were constructed by a superposition of several Yukawa potentials. Stopping powers of Al, Ni, Ag and Au were calculated for atoms with atomic number between 6 and 18. Calculated results showed that stopping powers oscillated with atomic number consistent with experimental data. Present results

also indicated that our approach made much improvement over other theoretical calculations. A comparison of presently calculated results with available theoretical and experimental data was made and discussed.

二、計劃緣由與目的

目前存在的理論模式¹⁻³，所計算出來的固體對低速原子之阻擋本領，和實驗結果相去甚遠。這些模式，均採用一個湯川位能，導出原子的電子分佈。而此分佈並無法顯示出電子軌域分佈的結構。因此本研究改良了存在的理論，建立了反應出真正原子殼層之電子分佈^{4,5}的阻擋本領理論。固體中傳導電子對原子電子分佈的屏蔽效應，也同時加以考慮。我們的理論模式能正確估算出針對低速原子之阻擋本能。而且由於離子有捕獲電子之可能，應有應用在離子上之潛力。

三、研究方法及成果

我們依據介電理論，採用了適用於所探討原子速度範圍的介電函數⁶⁻⁷，考慮了所有可能發生的激發，並利用了含固體中傳導電子屏蔽效應之原子殼層電子分佈，推出適用之阻擋本領計算公式。對速度為 v 之原子，其計算公式如下

$$-\frac{dE}{dx} = \frac{8v_F^4}{fV^2} \int_0^{v/v_F} u du \left\{ \int_0^{1-u} q | \dots_{ne}^s (2k_F q) |^2 \operatorname{Im} \left[\frac{-1}{\nu(q, u)} \right]_I \right. \\ \left. + \int_{1-u}^{1+u} q | \dots_{ne}^s (2k_F q) |^2 \operatorname{Im} \left[\frac{-1}{\nu(q, u)} \right]_{II} \right\}$$

其中 $q=k/2k_F$, $u=w/kv_F$, 而 k_F 和 v_F 分別代表費米波數及費米速度. k 和 w 則分別為動量能量之轉移. \dots_{ne}^s 為屏蔽動量電荷密度, $\operatorname{Im} \left[\frac{-1}{\nu} \right]_I$ 和 $\operatorname{Im} \left[\frac{-1}{\nu} \right]_{II}$ 為分別在 I 和 II 區之能量損失函數, 利用參考文獻(6)及(7)可求得.

圖(一)顯示氫原子在鋁中之屏蔽子分佈. 我們仔細地考慮了原子各電子軌域的電荷分佈. 實線表示本研究之結果, 虛線則為其他理論結果². 實線明顯看出電子之軌域結構.

圖(二)為氫原子之電荷分佈. 經過傅立葉轉換所得之動量電荷分佈. 圖中將自由原子, 受鋁傳導電子屏蔽之原子, 以及其他理論¹⁻³之動量電荷分佈做了比較.

圖(三)為鋁、鎳、銀及金對速度為 0.82 a.u. 之慢速原子之電子阻擋截面和原子序之關係圖. 計算中我們採用了區域場修正介電函數⁶⁻⁷, 可能激發的 I 及 II 區均涵蓋在內. 實心點所表示為本研究結果, 和空心點之實驗值⁸很接近, 而且隨原子序振盪現象和實驗吻合. 點虛線, 長劃虛線及鏈線為其他理論之結果¹⁻³. 這些其他理論計算則在可能的激發上均未能包括 II 區的激發.

圖(四)為鋁對氫原子阻擋截面和原子速度之關係. 為了方便比較, 其他理論之結果也畫在此圖上. 由此圖可見阻擋本領隨速度增加而線性加大.

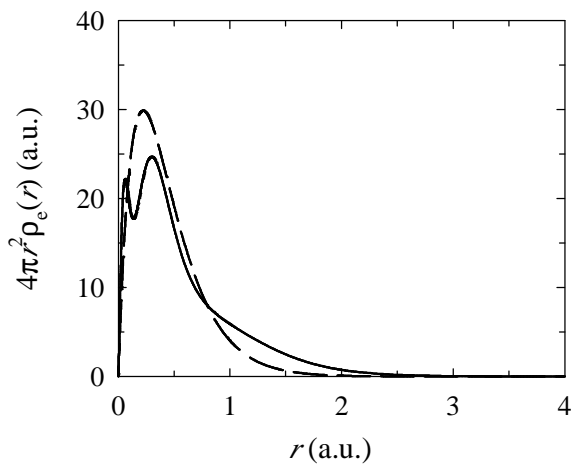
四、結果與討論

當原子速度小於固體的費米速度時, 只須考慮電子 - 電洞之激發, 而沒有電漿之激發, 此時可採用區域場修正之介電函數. 利用原子之軌域電荷分佈, 可顯示出阻擋本領隨原子序之振盪現象. 而對銀及金, 我們阻擋截面研究結果, 高於實驗值. 可能是由於區域場修正, 不含頻率效應, 對複雜能帶固

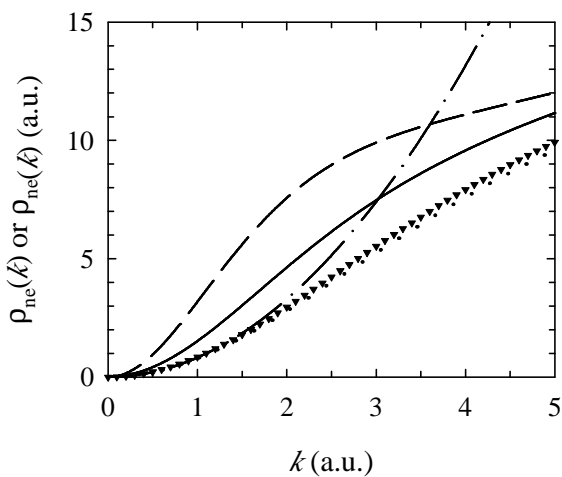
區域場修正, 不含頻率效應, 對複雜能帶固體, 不能完全適用.

五、參考文獻

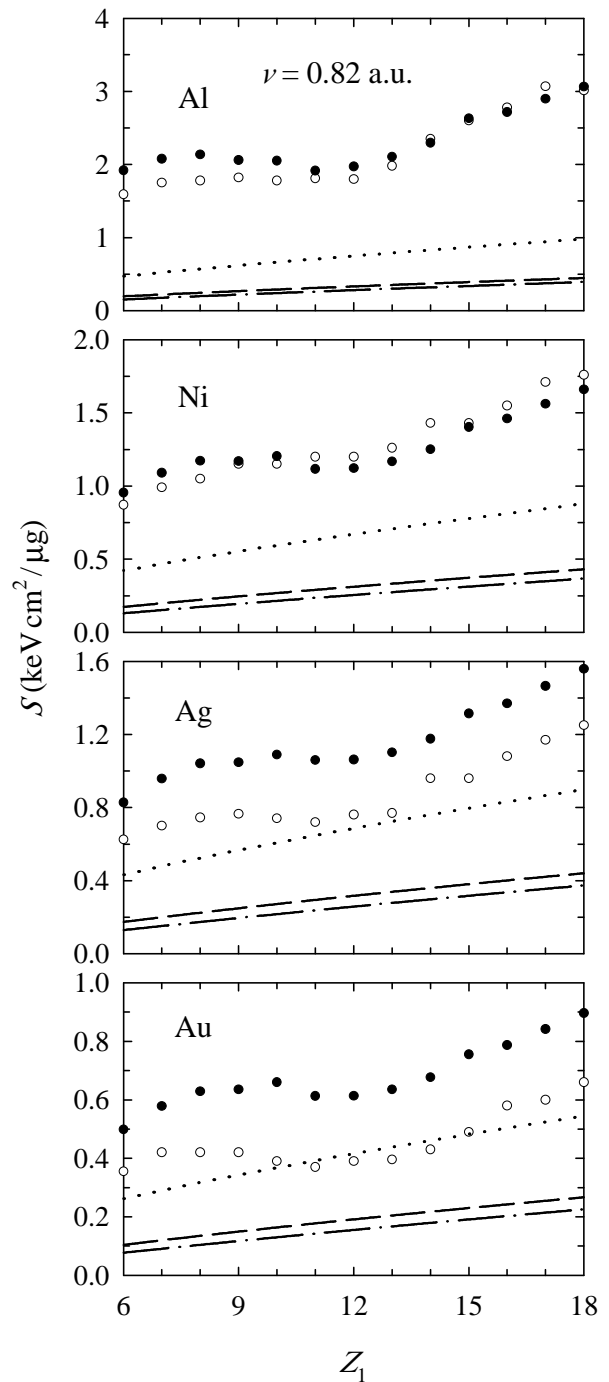
- [1] W. Brandt and M. Kitagawa, Phys. Rev. B **25**, 5631(1982).
- [2] T. Kaneko, Phys. Rev. A **41**, 4889 (1990).
- [3] Y. N. Wang and T. C. Ma, Phys. Rev. A **44**, 1768 (1992).
- [4] Y. F. Chen, C. M. Kwei, and C. J. Tung, J. Phys. B **26**, 1071 (1993).
- [5] F. Herman and S. Skillman, *Atomic Structure Calculations* (Prentice-Hall, New York, 1963)
- [6] K. Utsumi and S. Ichimaru, Phys. Rev. A **26**, 603 (1982).
- [7] Y. N. Wang and T. C. Ma, Nucl. Instrum. Methods B **51**, 216 (1990).
- [8] Y. N. Wang and W. K. Liu, Phys. Rev. A **54**, 636 (1996).
- [9] R. H. Ritchie, Phys. Rev. **114**, 644 (1959).
- [10] J. F. Ziegler, J. P. Biersack, and U. Littmark, *The Stopping and Range of Ions in Solids* (Pergamon, New York, 1985), p. 264.
- [11] D. Ward *et al.*, J. Can. Phys. **57**, 645 (1978).



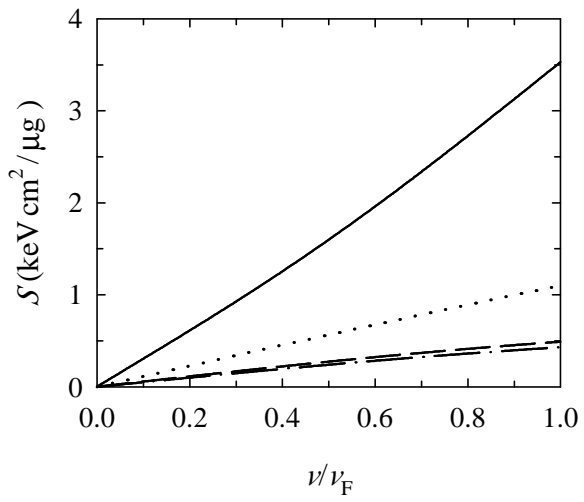
圖(一)氫原子在鋁中屏蔽之電子分佈．實線為本研究結果．虛線則為其他理論結果²．



圖(二)氫原子之動量荷電荷分佈．實線及長虛線分別為本研究含鋁之屏蔽效應及自由原子之結果．點虛線，鏈線及角型虛線則分別取自參考文獻(1)，(3)及(2)．



圖(三)鋁鎳銀及金對 0.82 a.u.慢速原子之阻擋截面和原子序之關係．實心點，空心點，點虛線，長劃虛線及鏈線分別本研究之結果，實驗數據，參考文獻(3)，(2)及(1)之結果．



圖(四)鋁對氫原子阻擋截面和原子速度之關係，實線，點虛線，長劃虛線及鏈線分別本研究之結果，參考文獻(3)，(2)及(1)之結果。