

К.И. БЕРЕСТОВ^{1,2}, С.Н. ЯНИН¹

*¹ Национальный исследовательский Томский
политехнический университет, г. Томск, Россия*

*² Объединенный институт ядерных исследований, г. Дубна, Россия
e-mail: kib5@jinr.ru*

ВЛИЯНИЕ ИОНИЗАЦИИ НА МЕЖАТОМНОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ В МЕТАЛЛЕ НА ПРИМЕРЕ АЛЮМИНИЯ

Воздействие интенсивных потоков ионизирующего излучения на металлические мишени вызывает различные физические явления, в числе которых дополнительная ионизация ионных остовов и возбуждение электронов проводимости. Как результат, в области трека быстрых заряженных частиц происходит изменение потенциалов межатомного взаимодействия между этими и окружающими их частицами. Кроме того, интересные эффекты возникают при увеличении энергии электронов проводимости вследствие изменения их экранирующих свойств [1].

Знание соответствующих процессов необходимо для изучения поведения частично или полностью ионизированного вещества. В качестве примера для исследования межатомных потенциалов в металлах, содержащих ионизированные состояния, был взят алюминий, характеристики которого хорошо изучены.

Расчеты основались на методе псевдопотенциалов с использованием модельных потенциалов Хейне-Абаренкова-Анималу с параметрами, которые были определены из спектроскопических термов свободных ионов в соответствии с методом квантовых дефектов [2].

Обнаружено, что ионизация приводит к сильному уменьшению глубины первого минимума потенциальной функции, соответствующей расстоянию между ближайшими соседями для трех - и четырехзарядных ионов. Более того, для пары четырехзарядных частиц первый минимум полностью исчезает. Атомы попадают на ветвь отталкивания потенциала взаимодействия. В результате кристаллическая решетка переходит в неравновесное состояние (рис. 1).

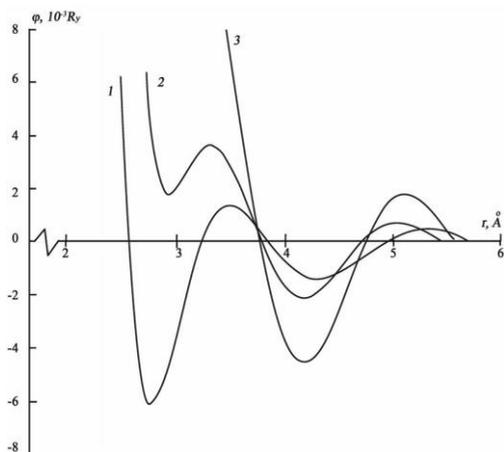


Рисунок 1 – Потенциалы межатомного взаимодействия:

- 1 – для двух трехзарядных ионов;
- 2 – для трех- и четырехзарядных ионов;
- 3 – для двух четырехзарядных ионов.

Полученные результаты могут быть использованы для молекулярно-динамического моделирования процессов радиационного дефектообразования металлов, а также для получения уравнения состояния вещества с различной степенью ионизации.

1. А.М. Шалаев, А.М.Адаменко, Радиационно – стимулированное изменение электронной структуры. М., Атомиздат, 1977, 176 с.
2. В.П. Кривобоков и С.Н. Янин, “Влияние ионизации на межатомное взаимодействие в металле”, Известия РАН, серия физическая, т. 56, № 6, с. 12-16, 1992.