

УДК 539.121.72

ПРЯМОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ НЕУПРУГОГО РАССЕЯНИЯ ЭЛЕКТРОНОВ

Л.В. Головяшкина, Н.Г. Находкин

Демонстрируются возможности методики, разработанной для исследования тонких характеристик сложных процессов взаимодействия частиц с веществом. Основу методики составляет моделирование реальной траектории каждой отдельной частицы методом Монте-Карло (метод прямого моделирования). Возникающие при этом вычислительные трудности в соответствии с [1] преодолеваются путем применения табличных методов счета и тщательного программирования основного цикла алгоритма.

В качестве объекта для отработки методики выбрано неупругое рассеяние электронов средних энергий ($220 Z \text{ эв} \leq E_0 \leq 4000 Z \text{ эв}$, где Z - атомный номер мишени). Термин "неупругое рассеяние" применяется для описания макроскопической картины явления - рассеяния и замедления электронов в твердом теле.

1. Физическая модель. Процессы неупругого рассеяния рассматриваются в приближении модели непрерывных потерь энергии. Торможение электронов в однородном теле описывается законом Бете [2]:

$$-\frac{dE}{ds} = \frac{2\pi e^4 Z N_A \rho}{A} \frac{1}{E} \ln \frac{1.16E}{J}, \quad (1)$$

где A - атомный вес, ρ - плотность, J - средний потенциал ионизации, N_A - число Авогадро, e - заряд электрона. Энергия электрона, прошедшего внутри вещества путь S , вычисляется из (1) по приближенной формуле [3]:

$$E = E_0 \sqrt{1 - c_1 S + c_2 S^2}, \quad (2)$$

где

$$c_1 = 0.9694 + \frac{0.8148}{Q}, \quad c_2 = \frac{0.8148}{Q} - 0.0305 + e^{-2Q},$$

$$Q = \ln \frac{1.16 E_0}{J},$$

а E_0 - начальная энергия электрона при $S = 0$.

В качестве единицы линейного масштаба выбран полный траекторный пробег R_0 , который вычисляется из (1) по приближенной формуле [3]:

$$R_0 = \frac{A}{4\pi e^2 Z N_A \rho} \frac{c_1 E_0^2}{Q} \quad (3)$$

Нормировка линейных размеров на пробег, как показал Спенсер [21], уменьшает зависимость характеристик рассеяния от начальной энергии E_0 . Область значений E_0 , при которых справедливы аппроксимации (2), (3), определяется соотношением $1.5 \leq Q \leq 7$.

Дифференциальное сечение упругого рассеяния $\frac{d\sigma}{d\Omega}$ представляет собой предложенную в работе [4] аппроксимацию по Вентцелю значений дифференциального сечения упругого рассеяния электронов, рассчитанного Бете с учетом атомного фактора экранирования по Томасу-Ферми, и определяется соотношением

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{Z^{2/3} \alpha_0^2}{4(2\pi)^4} \left[\frac{\alpha_1}{(1 + \alpha_2 \bar{u}^2)^2} + \frac{\alpha_3}{(1 + \alpha_4 \bar{u}^2)^2} \right]$$

Здесь α_0 - радиус первой боровской орбиты; $\alpha_1 = 3.23 \cdot 10^5$,

$\alpha_2 = 1.24 \cdot 10^3$, $\alpha_3 = 3.00 \cdot 10^3$, $\alpha_4 = 6.15 \cdot 10$ - безразмерные параметры аппроксимации, и вектор $\bar{u}$ определяется равенством

$$\bar{u} = \alpha_0 \frac{m \bar{v} Z^{-1/3}}{\hbar} \sin \frac{\theta}{2},$$

где m , $\bar{v}$ - масса и скорость электрона, θ - угол рассеяния. Данная разновидность модели была разработана А.А. Остроуховым и использована затем для аналитических расчетов коэффициентов неупругого отражения [5].

2. Результаты расчета и сравнение их с экспериментальными данными. Расчет был проведен для трех веществ - Be, Al, Pb - при некоторых значениях начальной энергии E_0 и различных углах падения первичного пучка θ_0 . Общие характеристики расчета приведены в табл. I.

Таблица I

Элемент	Число траекторий	Начальная энергия E_0 (кэВ)	Среднее число шагов при различных углах падения θ_0 (град.)				
			0	20	45	60	80
Be	4000	7.7	197	197	188	174	124
Al	4000	2.7	162	160	145	129	89
Al	4000	19.3	666	656	599	523	338
Pb	4000	12.7	908	868	755	663	409

2.1. Отражение. Сравнение вычисленных при реализации K траекторий ($K = 4000$) значений коэффициента отражения $\bar{R}$ с экспериментально измеренными значениями R_0 (табл. 2) показывает достаточно хорошее совпадение этих величин. В исследованной области энергий величина $\bar{R}$ слабо зависит от E_0 , уменьшаясь, например, для Al с ростом E_0 . При этом наиболее вероятная энергия энергетического спектра отраженных электронов ($E_6 = \frac{E_0}{E_0}$) и весь спектр слегка смещается в область меньших относительных энергий, как это видно из рис. I, на котором изображены гистограммы энергетического спектра неупруго отраженных от алюминиевой мишени электронов при двух

Таблица 2

E_0 (кэВ)	2.7	19.3	30
Элемент			
Al	0.188 ± 0.007	0.173 ± 0.006	0.166 ± 0.006 [8]
	0.21 ± 0.04 [17]	0.16 [13]	0.16 [13]
	0.19 [22]	0.20 ± 0.02 [17]	0.17 [12]
E_0 (кэВ)	7.7	Элемент	12.7
Be	0.039 ± 0.003	Pb	0.55 ± 0.03
	0.038 ± 0.004 [23]		0.5 [10]

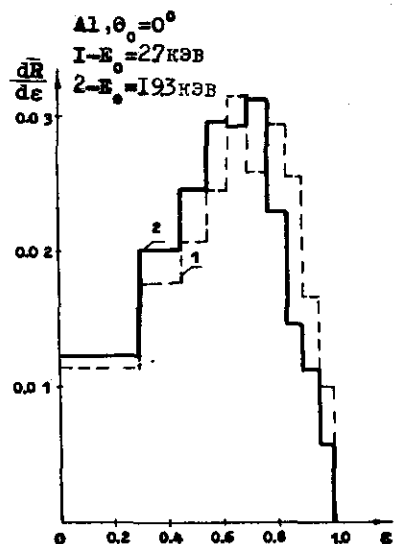


Рис. 1

значениях энергии: 1 - $E_0 = 2,7$ кэВ; 2 - $E_0 = 19,3$ кэВ. Эта особенность энергетического спектра согласуется с выводами, сделанными на основании обзора литературных данных в [10] и с экспериментальными данными [11].

Увеличение коэффициента неупругого отражения с ростом угла падения подтверждено расчетами [8,9], выполненными в рамках различных моделей, однако данные настоящего расчета (рис.2, сплошные кривые) лучше согласуются с опытом (пунктирные кривые) для Be и Al.

Гистограммы энергетического спектра отраженных электронов, полученные при различных

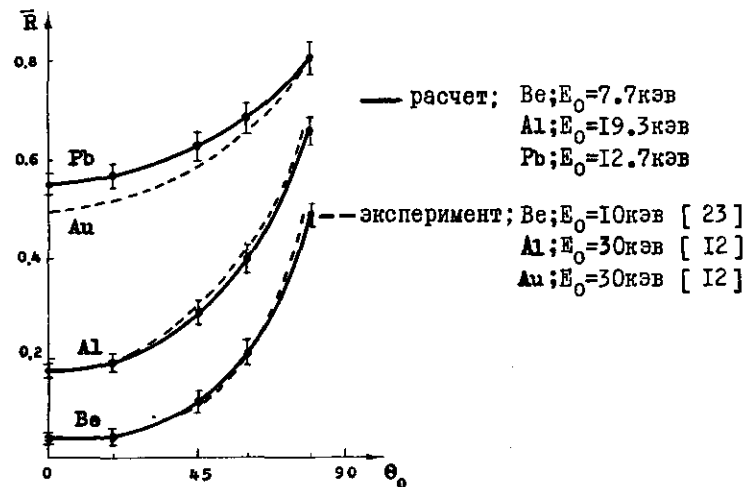


Рис. 2

углах падения θ_0 , в соответствии с эмпирическими данными [12,13], обнаруживают с ростом угла падения смещение всего спектра в область больших энергий ϵ и увеличение средней ($\bar{\epsilon}$) и наиболее вероятной энергии ϵ_f . Аналогичные результаты получены при расчете в работах [7,9]. Данные настоящего расчета лишь более подробные, что позволяет получить зависимость наиболее вероятной энергии ϵ_f от угла падения (табл.3).

Таблица 3

θ_0 (град.)	0	20	45	60	80
ϵ_f (расчет)	0.70-0.78	0.64-0.80	0.78-0.84	0.90-0.95	0.95-1.00
ϵ_f (эксп.) [12]	0.7	0.7	0.82	0.92	0.96

Толщинная зависимость. Данные расчета позволяют проследить изменение толщинной зависимости коэффициента неупругого отражения при изменении θ_0 . Соответствующее семейство расчетных кривых $\bar{R}(d)$, где d - толщина слоя, приведено в качестве примера для Be на рис.3 ($E_0 = 7,7$ кэВ,

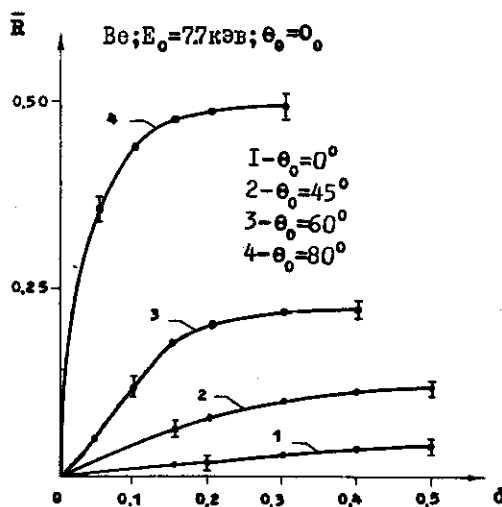


Рис. 3

$= 2.7$ кэВ, 19.3 кэВ) $= 0.4$; α_H (Pb; $E_0 = 12.7$ кэВ) $= 0.3$.

Таким образом, у веществ со средним атомным номером пробег, определяемый по значению α_H , как это часто делается экспериментаторами, примерно в 2.5 раза меньше истинного. Эти оценки, полученные из анализа кривых $\bar{E}(d)$, совпадают с опытными оценками [15].

Новым результатом является зависимость α_H от θ_0 . Оказывается, что α_H уменьшается с ростом θ_0 тем больше, чем меньше атомный номер мишени. Эта особенность толщинных кривых, полученная в рамках модели непрерывных потерь, была экспериментально обнаружена в [16,17].

Увеличение R_e с ростом d происходит за счет выхода электронов, потерявших при рассеянии значительную часть своей начальной энергии. Это подтверждается гистограммами распределения по энергиям неупруго отраженных электронов в слоях алюминия нескольких толщин (рис. 4). Расчетные распределения согласуются с опытными данными [11,18]. Зависимость наиболее вероятной энергии в спектре отраженных электронов от толщины слоя,

$\theta_0 = 0^\circ$). Аналогичный вид имеют расчетные кривые для других веществ (Al, Pb). Расчетные данные для толщинной зависимости коэффициента неупругого отражения хорошо согласуются с экспериментальными данными, измеренными для тонких свободных пленок [14]. Определяемые этими данными значения для эффективной глубины выхода (глубины насыщения - α_H) равны α_H (Be; $E_0 = 7.7$ кэВ) $= 0.5$; α_H (Al; $E_0 =$

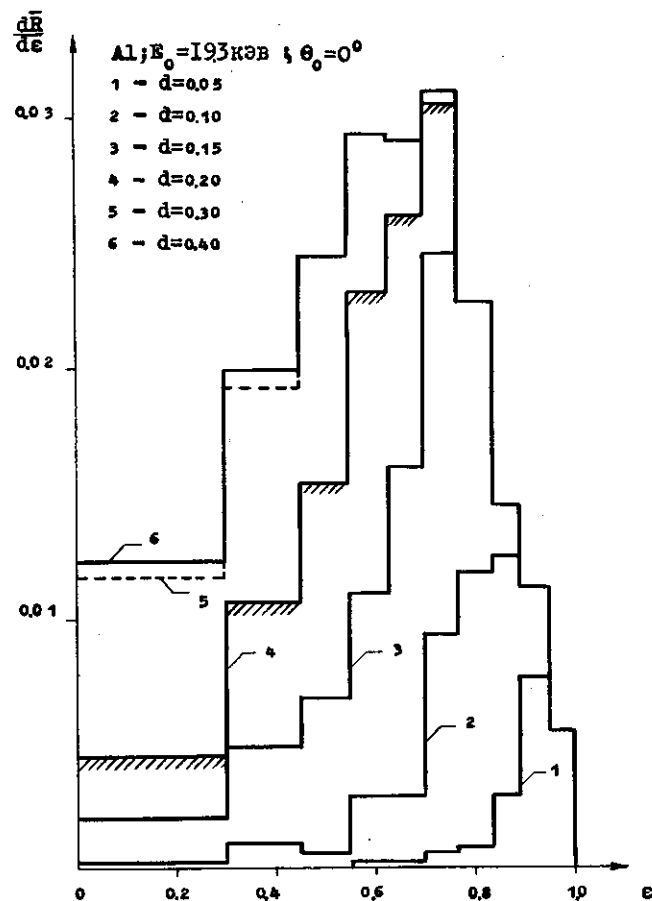


Рис. 4

например, для Al при $E_0 = 19.3$ кэВ, $\theta_0 = 0^\circ$ (рис. 5, сплошная кривая) удовлетворительно подтверждается экспериментальными данными [18] для Al при $E_0 = 25$ кэВ; $\theta_0 = 0^\circ$ (пунктирная кривая). При нанесении экспериментальных точек использовалось значение пробега первичных электронов, равное 620 мг/см².

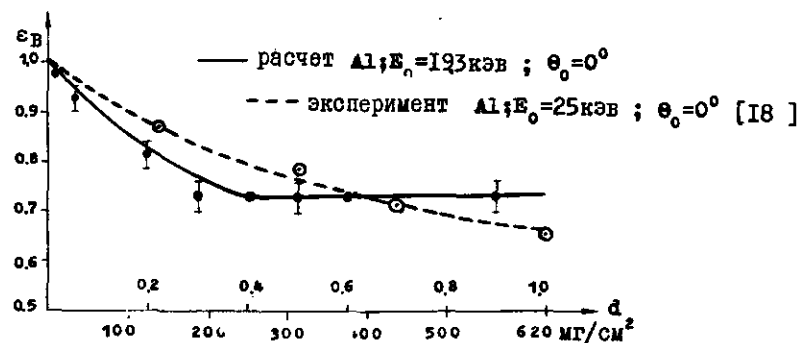


Рис. 5

Угловое распределение неупруго отраженных электронов. Типичные примеры гистограмм углового распределения неупруго отраженных электронов приведены на рис. 6. Электроны, отраженные массивной мишенью при нормальном падении первичного пучка, изотропно распределены в пространстве, о чем свидетельствует удовлетворительное выполнение закона косинуса. При уменьшении толщины мишени до значений $d < d_c$ изотропность нарушается, отраженные электроны выходят, главным образом, при больших углах θ .

При нормальном падении первичных электронов задача симметрична относительно оси, совпадающей с направлением пучка первичных электронов, поэтому угловое распределение $\bar{R}(\theta, \varphi)$ при любом фиксированном значении азимутального угла φ не теряет своих особенностей, если его проинтегрировать по углу φ от 0 до 2π [7-9]. При наклонном падении первичных электронов аксиальная симметрия нарушается, и задача становится симметричной лишь относительно плоскости падения. В этом случае, чтобы получить распределение не только по углу возвышения θ , но и по азимуту, необходимо запоминать значение угла φ в каждом акте рассеяния. Такое усложнение задачи позволяет получить угловое распределение отраженных электронов в плоскостях, определяемых фиксированным значением угла φ . В данном расчете получены угловые распределения отраженных электронов для трех

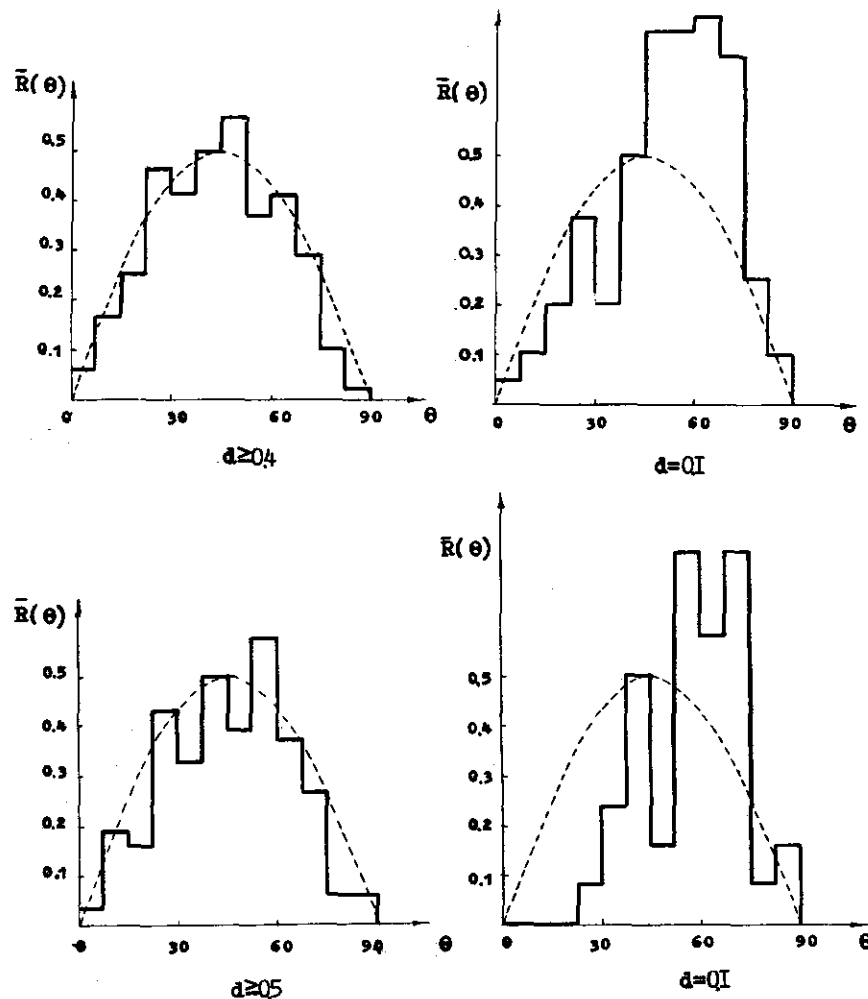


Рис. 6

значений φ :

$$0^\circ \leq \varphi_1 \leq \Delta; \quad 90^\circ - \Delta \leq \varphi_2 \leq 90^\circ; \quad 180^\circ - \Delta \leq \varphi_3 \leq 180^\circ,$$

где $\Delta = 10^\circ$. Плотность распределения для всех трех областей

изображена полярной диаграммой (рис. 7), которая построена для

$Al; E_0 = 27 \text{ кэВ}; \theta_0 = 45^\circ$

$K = 12000$

$1 - 0^\circ \leq \varphi_1 \leq 10^\circ$

$2 - 80^\circ \leq \varphi_2 \leq 90^\circ$

$3 - 170^\circ \leq \varphi_3 \leq 180^\circ$

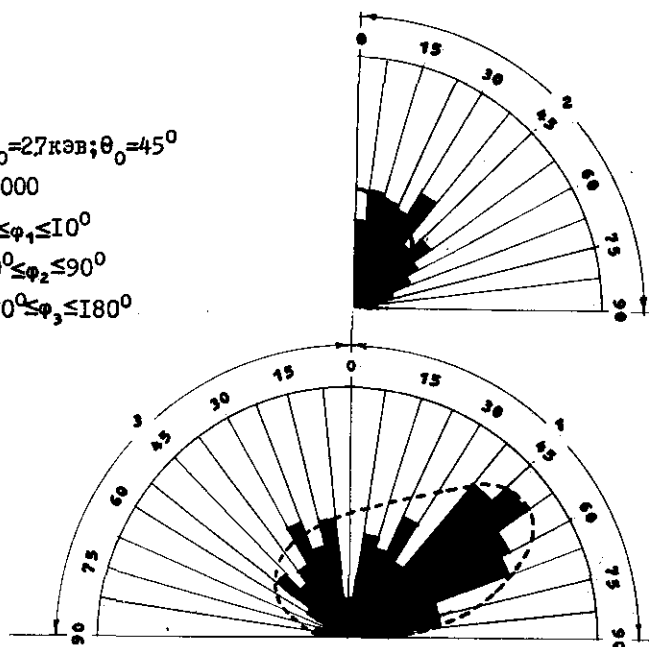


Рис. 7

Al при $E_0 = 2,7 \text{ кэВ}$; $\theta_0 = 45^\circ$; $K = 12000$. В соответствии с опытными данными [12] в плоскости падения наибольшее число отраженных электронов расположено вблизи направления зеркального отражения, а в перпендикулярном сечении имеет место почти изотропное распределение по углам возвышения.

2.2. Прохождение. В интересующей нас области энергий из-за технологических трудностей изготовления тонких свободных пленок очень мало надежных экспериментальных данных, посвященных исследованию зависимости от толщины слоя интегрального коэффициента прозрачности $\bar{T}_2$. Поэтому для сравнения расчетных данных $\bar{T}(d)$ с эмпирическими на рис. 8 представлены результаты измерений при больших энергиях $E_0 = 159 \text{ кэВ}$ [19]; совпадение расчетных и экспериментальных данных хорошее.

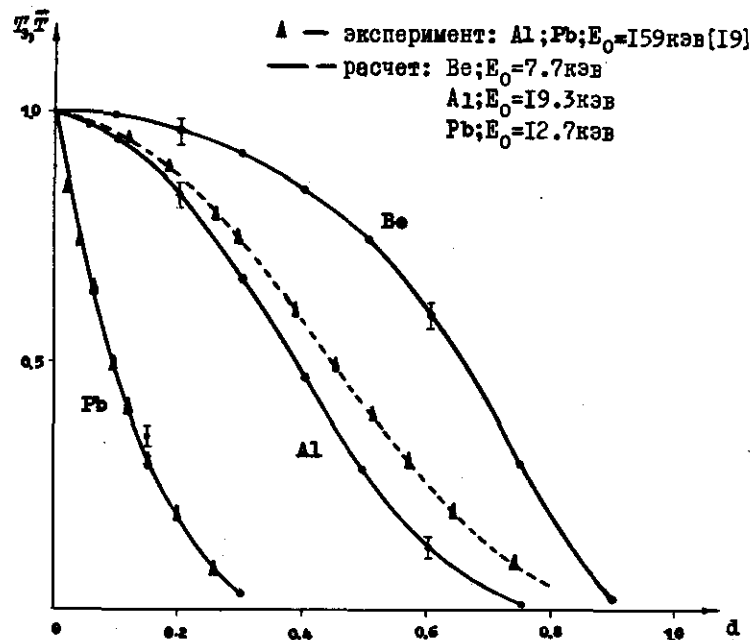


Рис. 8

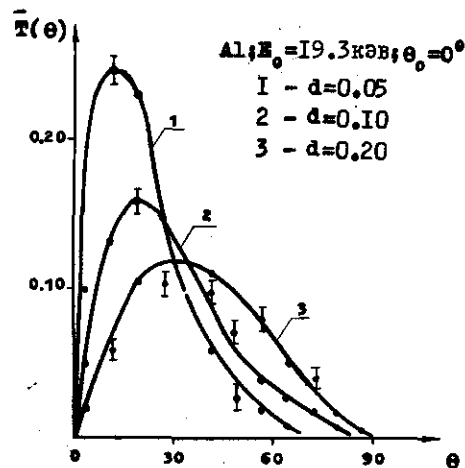


Рис. 9, а

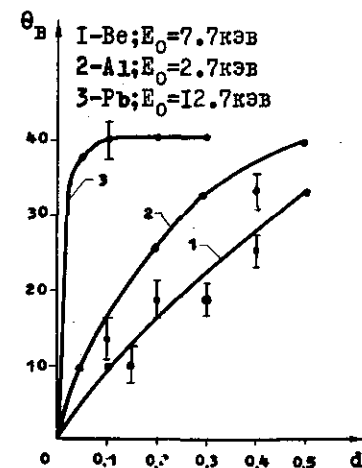


Рис. 9, б

Толщинные зависимости $\bar{T}(\alpha)$ при $\theta_0 > 0^\circ$ не получаются простой заменой толщины на эффективную $d_{\text{эфф}} = \frac{d}{\cos \theta_0}$, а изменяются более сложно, что определяется влиянием граничных условий для каждого слоя. Угловые зависимости коэффициента прозрачности будут исследоваться более подробно в следующей нашей работе.

Угловое распределение прошедших электронов. В случае нормального падения расчет дает согласующееся с опытом [14] распределение по углам вылета прошедших электронов в зависимости от толщины мишени α (рис. 9,а). Максимум на расчетных кривых позволяет определить наиболее вероятный угол рассеяния θ_g , который зависит от α . Рис. 9,б иллюстрирует эту зависимость тремя расчетными кривыми для Be, Al, Pb; согласие с опытными данными [14] удовлетворительное. Предельное значение θ_g при $\alpha \rightarrow 1$ в обоих случаях $\sim 40^\circ$ и слабо зависит от энергии и рода вещества.

Энергетическое распределение прошедших электронов. Расчет (рис.10) дает

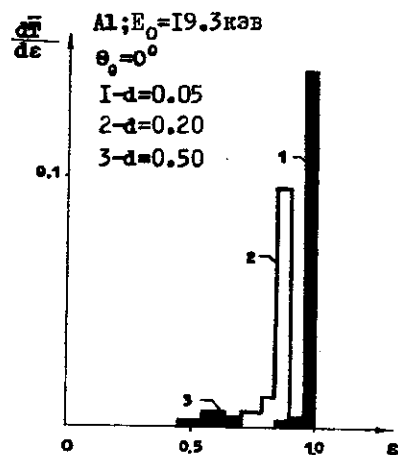


Рис. 10

типичное для этого случая энергетическое распределение прошедших электронов, согласующееся с расчетными [7] и опытными [14] данными других авторов. Однако экспериментальные кривые отличаются от расчетных резким обрывом в области больших ε ; указанное различие связано с тем, что в модели непрерывных потерь не учтены флуктуации потерь энергии.

Кроме разнообразных внешних характеристики, схема расчета позволяет вычислить также и некоторые внутренние

характеристики рассеяния, трудноизмеримые экспериментально.

2.3. Поглощение. Одним из примеров внутренних характеристик является распределение поглощенных электронов

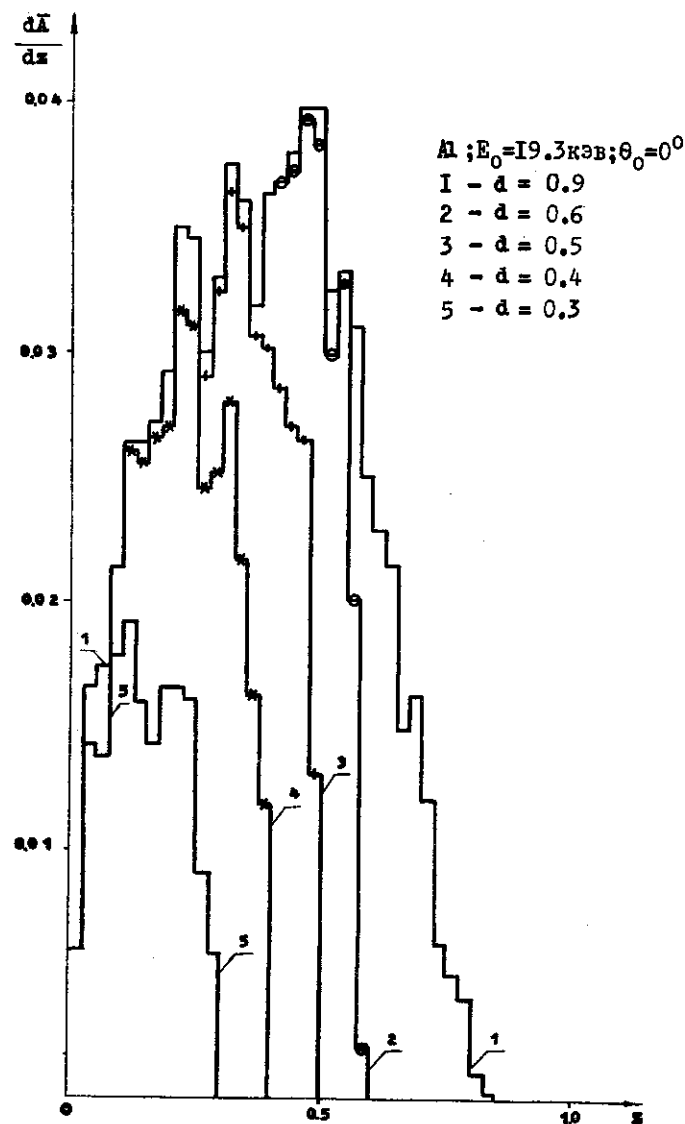


Рис. 11. Распределение поглощенных электронов по глубине слоя z .

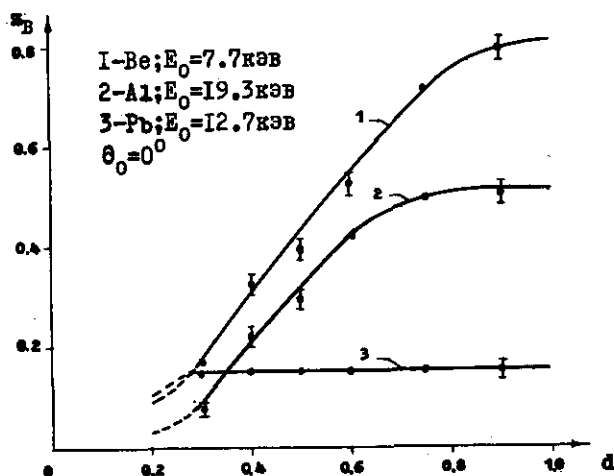


Рис. 12

нов по глубине слоя z . На рис. II представлены значения $\frac{d\bar{N}}{dz}$ для различных интервалов, $\bar{N}$ - коэффициент поглощения. Наиболее вероятная глубина поглощения z_b зависит от толщины слоя d , рода вещества и энергии электронов (рис.12). Данные о распределении поглощенных электронов по глубине имеют важное значение при исследовании внедренного в диэлектрик заряда, при записи информации электронным лучом и др. Зависимость $\bar{N}(z)$ согласуется с соответствующим распределением заряда, определяемым непрямым методом в [20].

Выводы

Для неупругого рассеяния электронов средних энергий получены характеристики трех типов: 1) характеристики, измеряемые и вычисляемые многими авторами (зависимость $\bar{N}$, τ от толщины мишени d , угла падения θ_0 и др.); 2) характеристики, для которых известны прямые экспериментальные, но нет расчетных данных других авторов (угловое распределение отраженных электро-

нов при фиксированном азимуте и др.); 3) характеристики, для которых, насколько нам известно из опубликованной литературы, нет ни расчетных, ни прямых экспериментальных данных (распределение поглощенных электронов по глубине слоя z , распределение рассеянных электронов по числу упругих соударений и др.).

Хорошее совпадение расчетных характеристик первого и второго типов с известными литературными данными позволяет с доверием относиться к результатам третьего типа, представляющим наибольший интерес.

В целом полученные результаты свидетельствуют о применимости модели непрерывных потерь для рассмотрения процессов неупругого рассеяния электронов средних энергий в твердом теле и об эффективности предложенной методики прямого моделирования.

Благодарим В.В.Кулемзину за помощь в разработке и отладке некоторых программ.

Л и т е р а т у р а

1. КОСАРЕВ Ю.Г. Моделирование неупругого рассеяния электронов методом Монте-Карло. - "Вычислительные системы", 1968, вып. 30, стр. 34-40.
2. BETHE H. Zur Theorie des Durchgangs schneller Korpuskularstrahlen durch Materie. - "Ann. der Phys.", 1930, Bd. 5, S. 325.
3. ОСТРОУХОВ А.А., НАХОДКИН Н.Г. Приближенное аналитическое выражение для пробега частиц, тормозящихся по закону Бете. - "Радиотехника и электроника", 1965, т.10, № 3, стр.522-529.
4. НАХОДКИН Н.Г., ОСТРОУХОВ А.А., РОМАНОВСКИЙ В.А. Влияние атомного фактора экранирования на неупругое отражение электронов. - "Физика твердого тела", 1965, т.7, №4, стр.1256-1259.
5. ОСТРОУХОВ А.А. Вычисление коэффициентов неупругого отражения и прохождения электронов средних энергий. - "Физика твердого тела", 1968, т.10, № 7, стр. 2105-2114.
6. BERGER M.J. Monte-Carlo calculation of the penetration and diffusion of fast charged particles. - "Methods in Computational Physics", 1963, vol.1, p.135-215.
7. GREEN M. A Monte-Carlo calculation of the spatial distribution of characteristic X-ray production in a solid target. - "Proceed. of the Phys. Society", 1963, vol.82, p.204-215.
8. BISHOP H.E. Electron scattering in thick targets. - "British J. of Applied Physics", 1967, vol.18, p.703-715.
9. MURATA K., MATSUKAWA T., SHIMIZU R. Monte-Carlo calculations on electron scattering in a solid target. - "Japanese J. of Applied Physics", 1971, vol.10, p.678-686.

10. THÜMMEL H. Zur Theorie der Rückstreuung monoenergetischer Elektronen. - "Zeitschrift für Physik", 1964, vol.179, p. 116-147.

11. КРЫНЬКО Ю.Н., МЕЛЬНИК П.В., НАХОДКИН Н.Г. Энергетические спектры электронов с энергией 0,4-12 кэВ, упруго и неупруго отраженных пленками некоторых веществ. - "Известия Академии наук СССР", серия физическая, т. XXXIII, № 3, стр. 481-488.

12. KANTER H. Zur Rückstreuung von Elektronen im Energiebereich von 10 bis 100 keV. - "Ann. der Phys.", 1957, Bd.20, S.144.

13. KULENKAMPFF H., SPYRA W. Energieverteilung rückdiffundierter Elektronen. - "Zeitschrift für Physik", 1954, Bd.137, S.416-425.

14. GOSSLET V.E., THOMAS R.N. Multiple scattering of 5 - 30 keV electrons in evaporated metal films. - "British Journal of Applied Physics", 1964, vol.15, p.883-907; vol. 16, p.779-796.

15. КАНИЧЕВА И.Р., БАРЗДО Б.Ф. Торможение и неупругое отражение электронов в тонких свободных пленках меди. - "Физика твердого тела", 1963, т.5, №9, стр. 2561-2569.

16. НАХОДКИН Н.Г., РОМАНОВСКИЙ В.А. Кинетика движения электронов при вторичной эмиссии с тонких пленок металлов и полупроводников. - "Радиотехника и электроника", 1960, т. 7, № 8, стр. 1275-1283.

17. НАХОДКИН Н.Г., ОСТРОУХОВ А.А., РОМАНОВСКИЙ В.А. Неупругое рассеяние электронов в тонких пленках. - "Физика твердого тела", 1962, т.4, № 6, стр. 1514-1524.

18. KULENKAMPFF H., RÜTTIGER K. Untersuchung der Energieverteilung rückdiffundierter Elektronen an dünnen Metallschichten. - "Zeitschrift für Physik", 1958, Bd.152, S.249-260.

19. SELIGER H.H. Transmission of positrons and electrons. - "Physical Review", 1955, vol.100, p.1029-1037.

20. БУТЕНКО А.Д., НАХОДКИН Н.Г., НЕМИЦЕВ В.П. Распределение заряда в диэлектрике. - "Журнал научной и прикладной фотографии и кинематографии", 1971, т. 16, № 1, стр. 59-61.

21. SPENCER L.V. Theory of electron penetration. - "Physical Review", 1955, vol.98, p.1597-1615.

22. БРОНШТЕЙН И.М., ФРАЙМАН Б.С. Вторичная электронная эмиссия, 1969, Москва, "Наука".

23. КРЫНЬКО Ю.Н., МЕЛЬНИК П.В., НАХОДКИН Н.Г., ЧЕРНЫЙ Б.С. Энергетическое и угловое распределение электронов, неупруго отраженных слоем бериллия. - "Украинский физический журнал", 1971, т. 15, № 5, стр. 808-811.

Поступила в ред.-изд.отд.

10 октября 1972 г.