

ԵՐԵՎԱՆԻ ՖԻԶԻԿԱՅԻ ԻՆՍՏԻՏՈՒՏ
ЕРЕВАНСКИЙ ФИЗИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ



ЕФИ-564(51)-82

А. Т. МАРГАРЯН

О МОДЕЛИРОВАНИИ ПЕРЕНОСА ЭЛЕКТРОНОВ
В ВЕЩЕСТВЕ МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО

ԵՐԵՎԱՆ 1982 ԵՐԵՎԱՆ

УДК. 519.263:001.57

А.Т.МАРГАРЯН

О МОДЕЛИРОВАНИИ ПЕРЕНОСА ЭЛЕКТРОНОВ В ВЕЩЕСТВЕ
МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО

Предлагается модель переноса электронов по схеме "укрупненных" соударений, которая хорошо описывает наблюдаемые на эксперименте закономерности как для электронов с энергиями выше 10 кэВ, так и порядка килоэлектронвольт.

Ереванский физический институт
Ереван 1982

EDM-564(5I)-82

A.T.MARGARYAN

ON THE MONTE CARLO SIMULATION
OF ELECTRON TRANSFER IN MATTER

A model of electron transfer by collision grouping scheme is proposed which describes well the regularities observed in the experiment for electrons with energies both above 10 keV and of keV order.

Yerevan Physics Institute

Yerevan 1982

ЕРЕВАНСКИЙ ФИЗИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ

БФИ-564(51)-82

А.Т.МАРГАРЯН

О МОДЕЛИРОВАНИИ ПЕРЕНОСА ЭЛЕКТРОНОВ В ВЕЩЕСТВЕ
МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО

Ереван 1982

© *Ереванский физический институт. 1982*

Введение

Одним из решений задач переноса электронов в веществе является моделирование процесса переноса методом Монте-Карло. Этой проблеме посвящена работа [1], где приведены также результаты расчетов для электронов в интервале энергий $0.4 + 6$ МэВ. В работе [2] рассматривался перенос электронов с энергиями 10–30 кэВ по схеме "укрупненных" соударений, когда розыгрыши производятся после прохождения некоторого отрезка пути ΔS из распределений, характеризующих многократное рассеяние частиц на этом отрезке. В работе [3] отмечались недостатки схемы "укрупненных" соударений в случае ее применения в области энергий ниже 10 кэВ и для этой области энергии была предложена схема индивидуальных столкновений, когда розыгрыши производятся после каждого элементарного акта. Расчет по схеме индивидуальных столкновений требует с одной стороны детальной информации о сечениях элементарных актов, а с другой — много времени на ЭВМ.

В этой работе предлагается модель "укрупненных" соударений, которая хорошо описывает перенос электронов как с энергиями вы-

ше 10 кэВ, так и с энергиями порядка килоэлектронвольт.

Множественное рассеяние

Множественное рассеяние электронов учитывалось согласно теории Мольера, поправленной для случаев прохождения через тонкие слои вещества, когда число столкновений < 20 [4].

Для вероятности рассеяния электронов в интервале $\theta \div \theta + d\theta$ после прохождения слоя t Мольер дает выражение:

$$f(\theta, t) \theta d\theta = [f^0(\nu) + B^{-1} f^1(\nu) + B^{-2} f^2(\nu) + \dots] \nu d\nu. \quad (I)$$

Учет только первых трех членов ряда (I) обеспечивает точности порядка 1%. Явный вид функций f^0 , f^1 и f^2 приведен в работах [4,6]. Безразмерная переменная ν связана с углом рассеяния θ и параметром теории B соотношением

$$\nu = \theta / \sqrt{\chi_e^2 B}, \quad (2)$$

где

$$\chi_e^2 = 0,1569 \left\{ Z(Z+1) Z^2 / A \right\} \left\{ t / (P\nu)^2 \right\}. \quad (3)$$

Параметр B получается из решения трансцендентного уравнения

$$B - \ln B = b, \quad (4)$$

где

$$b = \ln \Omega_0. \quad (5)$$

$$\Omega_0 = \frac{6702,33 (Z+1) Z^{1/3} Z^2 t}{B^2 A (1 + 3,34 \alpha^2)}. \quad (6)$$

Z - заряд первичной частицы

Z - порядковый номер вещества

t - толщина слоя ($\text{г}/\text{см}^2$)

A - атомный вес

$p\gamma$ - импульс, умноженный на скорость первичной частицы (МэВ)
 $\beta = v/c$, c - скорость света.

В работе [4] было показано, что при малых толщинах, когда $\beta \ll \beta_0$ ($\beta_0 = 2,32$), если использовать значение $\beta = \beta_0$, то результат теории Мольера практически совпадает с результатом моделирования процесса многократного рассеяния по схеме индивидуальных столкновений, который справедлив для любых толщин.

Моделирование переноса электронов и результаты расчетов

Траектория электрона разделилась на малые отрезки ΔS_i . После каждого отрезка скачкообразно менялись направление и энергия электрона, а также определялась величина следующего отрезка

$$E_i = E_{i-1} - \frac{dE}{dS} \Delta S_{i-1},$$

$$\Delta S_i = \frac{E_i}{E_{i-1}} \Delta S_{i-1}$$

где $\frac{dE}{dS}$ - энергетические потери электрона, которые в области энергии выше 10 кэВ учитывались согласно теории Бете-Блоха, ниже 10 кэВ согласно теории Аккермана-Чернова [6], $\Delta S_0 = 0.031$ и 0.15 мкм для золота и алюминия, соответственно, при $E_0 = 30$ кэВ. Направление менялось за счет многократного рассеяния на отрезках ΔS_i . Путь электрона в веществе продолжался до тех пор, пока он не выходил из него или не поглощался, т.е. пока энергия не становилась меньше $E_{\text{пор}}$ ($E_{\text{пор}} = 0.5$ и 0.3 кэВ для золота и алюминия, соответственно). В этих расчетах вторичные электроны не учитывались. На рис. 1 и 2 приведены вычисленные таким образом коэффициенты отражения Γ и пропускания η в

случае, когда на тонкие пленки из золота и алюминия разных толщин перпендикулярно падают электроны с начальной энергией 5, 10, 15, 20 и 30 кэВ, совместно с экспериментальными результатами Вятскина и Трунева [7]. Толщина пленок приведена в единицах \bar{X} ($\bar{X} = 16 E^{1.6}$ и $145 E^{1.6}$ Å для Au и Al , соответственно, E — начальная энергия электронов в килоэлектронвольтах). На рис. 3 приведена зависимость коэффициента пропускания η от толщины пленок для Al , в случае перпендикулярного падения электронов с энергией 2 кэВ, совместно с результатами расчета Аккермана-Чернова [3], вычисленная по схеме индивидуальных столкновений, которая хорошо воспроизводит экспериментальные результаты. Как видно, существует хорошее согласие между результатами наших расчетов с экспериментальными результатами Вятскина и Трунева и с расчетами Аккермана и Чернова. На рис. 4 приведены коэффициенты отражения от массивных образцов Au и Al в зависимости от угла падения электронов с энергией 30 кэВ, совместно с экспериментальными и расчетными результатами [2]. И в этом случае наши расчеты хорошо воспроизводят закономерности, наблюдаемые в эксперименте.

Таким образом, описанная в этой работе модель переноса электронов по схеме "укрупненных" соударений хорошо описывает наблюдаемые на эксперименте закономерности как для электронов с энергиями выше 10 кэВ, так и для электронов с энергиями порядка килоэлектронвольт и может найти применение для решения разных задач.

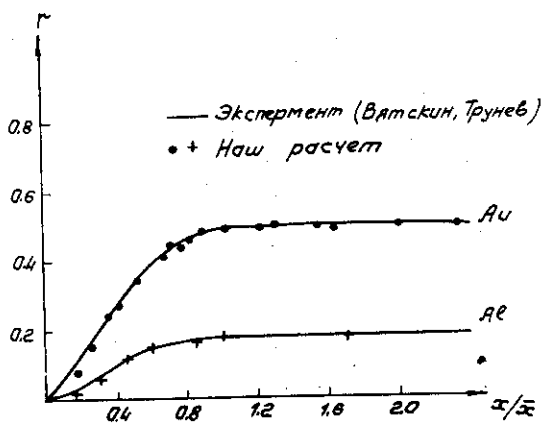


Рис. I

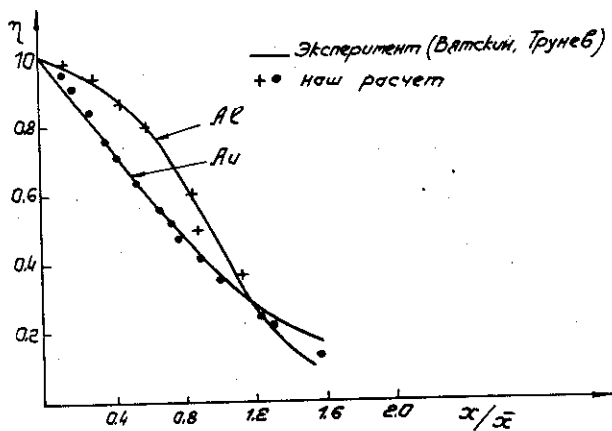


Рис. 2

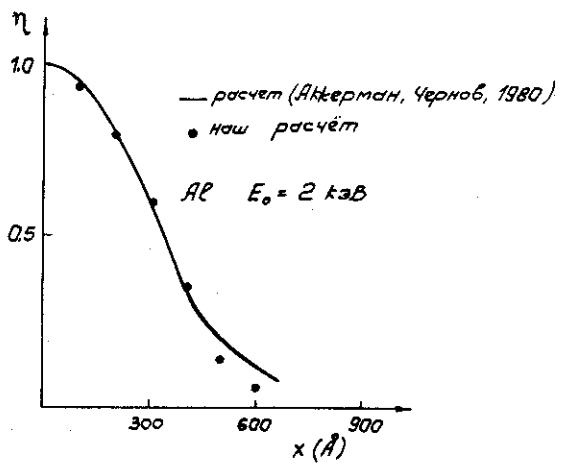


Рис.3

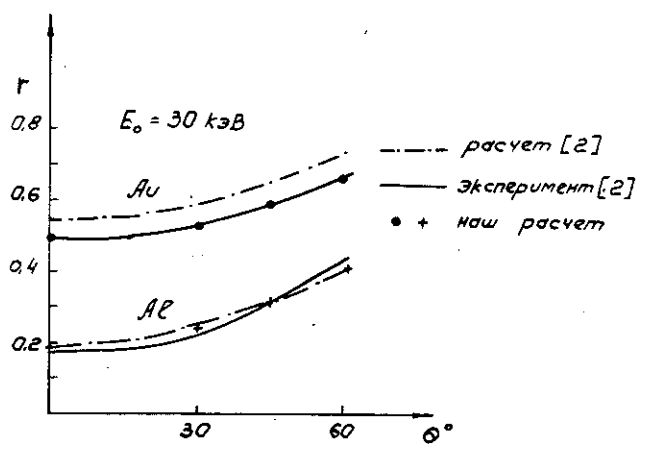


Рис.4

ПОДПИСИ К РИСУНКАМ

Рис.1 Коэффициенты отражения электронов с энергией 5, 10, 15, 20 и 30 кэВ при перпендикулярном падении на фольги из золота и алюминия разных толщин. Сплошные кривые соответствуют эксперименту Вятскина и Трунева.

Рис.2 Коэффициенты пропускания электронов с энергией 5, 10, 15, 20 и 30 кэВ при перпендикулярном падении на фольги из золота и алюминия разных толщин. Сплошные кривые соответствуют эксперименту Вятскина и Трунева.

Рис.3 Коэффициенты пропускания электронов с энергией 2 кэВ при перпендикулярном падении на фольги из алюминия разных толщин. Сплошная кривая соответствует расчету Аккермана и Чернова.

Рис.4 Коэффициенты отражения электронов с энергией 30 кэВ от массивных образцов золота и алюминия в зависимости от угла падения. Сплошные и пунктирные кривые взяты из работы [2] и соответствуют экспериментальным и расчетным данным.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Аккерман А.Ф., Никитушев Ю.М., Ботвин В.А. Решение методом Монте-Карло задач переноса быстрых электронов в веществе. Изд. "Наука", Каз.ССР, Алма-Ата, 1972.
2. Shimizu R., Ikuta T., Murata K. The Monte Carlo Technique as Applied to the Fundamentals of EPMA and SEM Journal of Applied Physics, 1972, vol.43, N.10, p.4233-4249
3. Akkerman A.F., Chernov G.Ya. Monte-Carlo Calculation of the Electron Transmission, Reflection and Absorption in Solids in the Energy Range up to 10 KeV. Phys.Stat.Sol., 1980, vol.101, p.109-116.
4. Маргарян А.Т. Многократное рассеяние в тонких слоях вещества. Препринт ЕММ-431(38)-80, Ереван, 1980.
5. Bethe H.A., Molier's Theory of Multiple Scattering. Phys.Rev., 1953, vol.89, p.1256-1266.
6. Akkerman A.F. and Cherenkov G.Y. Mean Free Paths by Inelastic Interactions, Stopping Powers and Energy Straggling for Electrons of Energies up to 20 KeV in Various Solids. Phys.Stat.Sol.(b), 1978, vol.89,1, p.329-333.
7. Вятский А.Я., Трунев В.В. Прохождение, отражение и поглощение электронов в тонких пленках твердого тела, Радиотехника и электроника, 1967, т.ХП, № 9, с.1636-1642.

Рукопись поступила 20-го апреля 1982 г.

Редактор Л.П.Мукаян
Тех.редактор А.С.Абрамян

Заказ 268

ВФ- 03679

Тираж 299

Препринт ВФИ

Формат издания 60x64/16

Подписано к печати 20/УЦ-82

0.8 уч.-изд.л. Ц. 10 к.

Издано Отделом научно-технической информации
Ереванского физического института, Ереван 36, Маркаряна 2



индекс 3624