

ИЗВЕСТИЯ
АКАДЕМИИ НАУК СССР

СЕРИЯ ФИЗИЧЕСКАЯ

Том XXXVII

(ОТДЕЛЬНЫЙ ОТТИСК)

12

УДК 539.121.72

Л. В. ГОЛОВЯШКИНА, Ю. Г. КОСАРЕВ и Н. Г. НАХОДКИН

ПРЯМОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ НЕУПРУГОГО РАССЕЯНИЯ ЭЛЕКТРОНОВ. ОСОБЕННОСТИ УГЛОВОГО РАСПРЕДЕЛЕНИЯ

Введение

Большинство работ по исследованию неупругого рассеяния электронов относится к области высоких энергий ($E \geq 40\,000$ эв). Для этой области обоснованно применяется модель непрерывных потерь [1–3], справедливость которой подтверждена многочисленными экспериментами и машинным моделированием [4–9]. Особо следует отметить японские работы последних лет [7, 8], в которых получены различные дифференциальные характеристики для массивных мишеней.

Весьма важная практически * и интересная теоретически область средних энергий ($500 < E < 40\,000$ эв) пока мало изучена. Для этой области нет простой теоретически обоснованной модели физического процесса, сложны прямые физические эксперименты (особенно при исследовании прозрачности) и встречаются значительные трудности при вычислении методами математического моделирования.

Для изучения рассеяния электронов данной области энергий Кафедрой физической электроники Киевского университета и Институтом математики СО АН СССР проведен комплекс теоретических, экспериментальных и машинных исследований. Разработана методика физического эксперимента для измерения дифференциальных характеристик отраженных электронов, а также предпринята попытка распространить на данную область энергий модель непрерывных потерь путем соответствующего подбора коэффициентов в формулах для сечений [9]. Предположение о возможности расширения области применимости модели непрерывных потерь находит все больше подтверждений по мере продвижения исследований в область низких энергий. Необходимость в тщательной проверке данного предположения исключает возможность ограничиться применением методик моделирования, использующих для облегчения счета те или иные усреднения (например, метод «укрупненных» соударений и подобные ему [10]). Поэтому была разработана методика прямого машинного моделирования траектории каждой частицы методом Монте-Карло. Встречающиеся при этом вычислительные трудности преодолены на основе применения табличных методов счета и тщательного программирования основного цикла алгоритма [11].

С помощью данной методики получены многочисленные интегральные и дифференциальные характеристики неупругого рассеяния электронов для области как средних, так и высоких энергий. Для высоких энергий получено хорошее согласие с результатами других авторов [5, 6], что указывает на допустимость применения данной методики. Особенно следует отметить хорошее совпадение с результатами японских исследователей [7, 8], опубликованных уже после завершения данного цикла работ.

Для более полной проверки применимости модели непрерывных потерь в области средних энергий электронов были выбраны мишени с малым (Be), средним (Al) и большим (Pb) значениями атомного номера Z , для которых рассмотрен широкий круг толщинных зависимостей и пространственных распределений электронов.

1. Модель физического процесса

Выбрана разновидность модели непрерывных потерь Бете, уточненная Остроуховым [12], которая предусматривает: 1) вычисление энергии E электрона, прошедшего путь s , по приближенной формуле

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

* Достаточно сказать, что именно эта область энергий используется во вторично-эмиссионных приборах, телевидении, приборах для записи информации и др.

(где E_0 — энергия электрона при $s=0$; c_1 и c_2 — константы, зависящие от вещества мишени и E_0); 2) нормировку линейных размеров на полный траекторный пробег; 3) аппроксимацию по Вентцелю значений бетевского дифференциального сечения упругого рассеяния электронов с учетом экранирования по Томасу — Ферми.

Данная разновидность модели хорошо согласуется с методикой прямого моделирования и допускает широкое применение табличных методов для сокращения времени счета. Благодаря этому открывается возможность машинного расчета различных дифференциальных характеристик с учетом толщинных зависимостей, угловых распределений и т. п., а также учета статистических разбросов в модели непрерывных потерь путем сравнительно простого пересчета результатов, полученных для различных толщин и начальных энергий.

2. Особенности машинного счета

Существенная особенность алгоритма и программы, как уже упоминалось выше, заключается в применении табличных методов для ускорения счета. Основной объем памяти ($\sim 2-5 \cdot 10^5$ ячеек) занимают таблицы двумерных функций:

$$\Delta s = f_1(s, \gamma_1) \quad \text{и} \quad P_s = f_2(s, \gamma_2).$$

Здесь γ_1 и γ_2 — случайные числа, равномерно распределенные в интервале $(0, 1)$; Δs — длина пробега электрона между двумя соударениями, P_s — угол рассеяния при упругом соударении. Монотонное изменение s позволяет разделить эти таблицы на участки (s_k, s_{k+1}, \dots) и вести расчет одновременно для группы электронов, пока путь для каждого из них не превысит s_{k+1} . После этого вводится участок таблиц (s_{k+1}, s_{k+2}) и т. д. до энергий электронов, соответствующих пути $s \approx 1$, когда электрон считается поглощенным. Параметры электронов, при которых происходит отражение, прохождение через слой заданной толщины или поглощение, фиксируются и запоминаются на магнитной ленте. Таким образом, процесс счета разделяется на три этапа: счет таблиц, собственно моделирование и получение характеристик на основании обработки запомненных конечных состояний электронов.

3. Результаты и их обсуждение

Методика прямого моделирования позволяет в принципе получать различные дифференциальные характеристики исследуемого явления с любой степенью детализации. Поэтому могут быть получены любые из известных нам характеристик, приводимых другими авторами [4–8]. Благодаря запоминанию результатов моделирования на магнитной ленте получение новых характеристик, как правило, не требует повторения моделирования и счета таблиц.

Из множества полученных характеристик приведены три группы дифференциальных характеристик: 1) для отражения (рис. 1, 2), которые служат для оценки как методики, так и физической модели; 2) для прохождения (рис. 3–6), которые не имеют надежных экспериментальных аналогов (из-за трудностей изготовления свободно висящих тонких слоев) и могут сопоставляться лишь с характеристиками для более высоких энергий; 3) для поглощения (рис. 7, 8), эти характеристики также не имеют аналогов для средних энергий, и они сопоставляются с имеющимися характеристиками для высоких энергий. Основное внимание при этом уделено угловым распределениям рассеянных электронов.

1. Отражение. Типичные примеры гистограмм углового распределения неупруго отраженных электронов приведены на рис. 1. Электроны, отраженные массивной мишенью при нормальном падении первичных электронов, изотропно распределены в пространстве, о чем свидетельствует полярная диаграмма (рис. 1, а). При уменьшении толщины мишени до значений d , меньших толщины максимума поглощения электронов, изотропность нарушается. Отраженные электроны выходят, главным образом, при больших углах X , отсчитанных от нормали. Эта особенность углового распределения отмечалась ранее [13] и наблюдалась на опыте в [14].

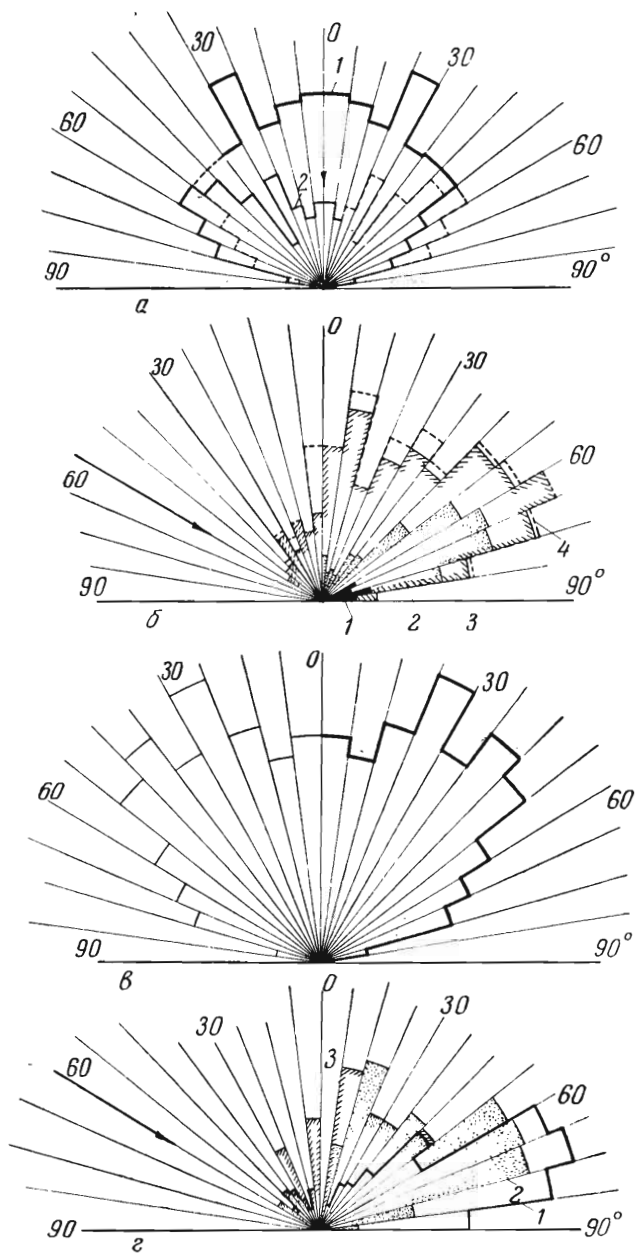


Рис. 1. Полярная диаграмма неупруго отраженных от пленок алюминия электронов при $E_0=2,6$ кэв.

- а) $\theta=0$: 1 - $d=0,9$; 2 - $d=0,1$.
 б) Угловое распределение в плоскости падения при различных толщинах ($\theta=60^\circ$): 1 - $d=0,01$; 2 - $d=0,05$; 3 - $d=0,2$; 4 - $d=0,9$.
 в) Угловое распределение в перпендикулярной плоскости ($\theta=60^\circ$).
 г) Угловое распределение в плоскости падения при различных энергиях отраженных электронов ϵ : 1 - $\epsilon=0,9 \div 1$; 2 - $\epsilon=0,83 \div 0,9$; 3 - $\epsilon=0,45 \div 0,55$

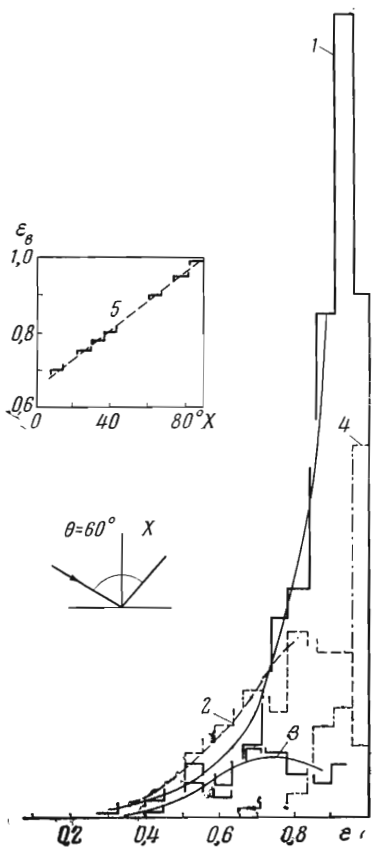


Рис. 2

Рис. 2. Энергетический спектр неупруго отраженных электронов (Al, $E_0=2,6$ кэв, $\theta=60^\circ$) при различных углах возвышения X в плоскости падения: 1 - $X=60 \div 67,5^\circ$; 2 - $X=30 \div 37,5^\circ$; 3 - $X=7,5 \div 15^\circ$; 4 - $X=82,5 \div 90^\circ$; 5 - зависимость наиболее вероятной энергии от X

Рис. 3. Зависимость наиболее вероятного угла рассеяния прошедших электронов X_B от толщины d для Be, Al и Pb при $\theta=0$: 1 - Be, $E_0=7,7$ кэв; 2 - Al, $E_0=2,6$ кэв; 3 - Al, $E_0=19,3$ кэв; 4 - Pb, $E_0=12,7$ кэв

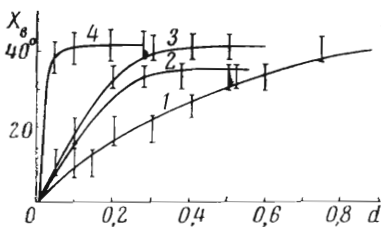


Рис. 3

При косом падении первичного пучка симметрия в угловом распределении неупруго отраженных электронов сохраняется только относительно плоскости падения. В плоскости падения отраженные электроны рассеиваются главным образом «вперед» (почти в направлении зеркального отражения), а в перпендикулярном сечении имеет место почти изотропное распределение по углам возвышения (рис. 1, б, в).

Расчетные и экспериментальные результаты в области больших энергий были описаны в [8, 15]. Наши данные отличаются не только областью меньших энергий E_0 , но и большей подробностью. Например, они позволяют проследить, как изменяется вид углового распределения отраженных электронов с уменьшением толщины мишени, а также с увеличением потери энергии (рис. 1, б, г). С уменьшением d угловой максимум распределения приближается к поверхности мишени, что объясняется уменьшением вероятности рассеяния электронов на большие углы в тонких пленках. При $d=\text{const}$ электроны, потерявшие значительную долю своей энергии [$\epsilon \neq (E/E_0) < 1$], должны испытать много соударений, поэтому их угловое распределение более изотропно, чем у электронов с $\epsilon \approx 1$ (рис. 1, г).

Наш расчет позволяет получить вид энергетического спектра неупруго отраженных электронов при различных углах вылета X . Типичный пример таких спектров для массивного алюминия при нескольких X и угле падения первичного пучка $\theta=60^\circ$ приведен на рис. 2. Вид спектра

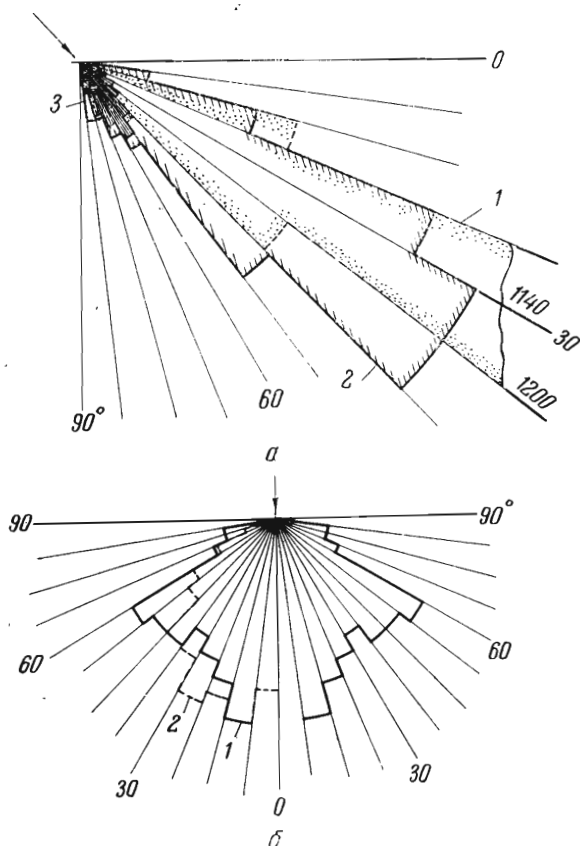


Рис. 4. Угловое распределение прошедших электронов Al ($E_0=2,6$ кэв, $\theta=60^\circ$) при различных толщинах.
 а) В плоскости падения: 1 - $d=0,01$; 2 - $d=0,05$; 3 - $d=0,2$.
 б) В перпендикулярной плоскости: 1 - $d=0,05$; 2 - $d=0,2$

и тенденция его изменения с изменением X согласуется с экспериментом в данной области E_0 [16] и в области больших E_0 [15].

Таким образом, не только интегральные и полудифференциальные [13], но и дифференциальные характеристики отраженных электронов, вычисленные в рамках принятой модели, находятся в согласии с экспериментальными данными.

2. Прохождение. В нашей предыдущей работе [13] приводились зависимости прошедших электронов от толщины слоя $T(d)$, которые из-за отсутствия надежных опытных данных в области малых энергий сравнивались с данными, полученными в области больших E_0 . Там же получено распределение прошедших электронов по углам вылета X в зависимости от толщины мишени. Оказалось, что при различных d большинство электронов рассеивается в направлении наиболее вероятного угла X_v . Пример зависимости X_v от d (рис. 3) показывает, что предельный, наиболее вероятный угол X_v при $d \rightarrow 1$ слабо зависит от рода вещества и равен приблизительно 40° . Эти особенности углового распределения прошедших электронов при $\theta=0$ согласуются с экспериментальными данными в области больших E_0 [17] и нет оснований считать, что в ин-

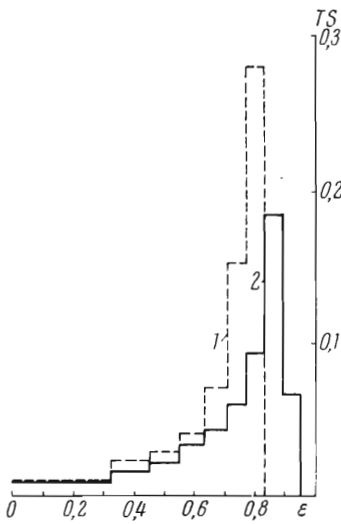


Рис. 5

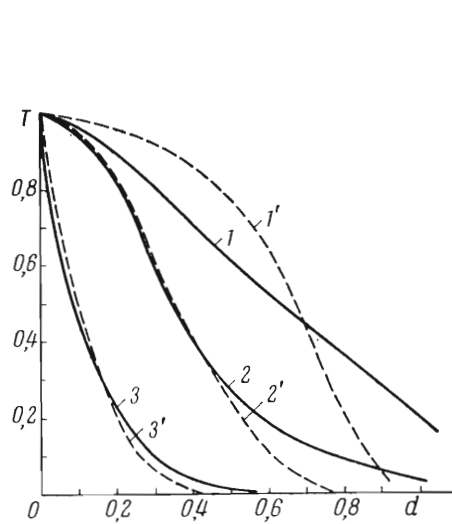


Рис. 6

Рис. 5. Энергетическое распределение прошедших электронов (Al, $E_0=19,3$ кэв, $\theta=0$, $d=0,3$): 1 – без учета статистического разброса пробегов, 2 – с учетом статистического разброса пробегов

Рис. 6. Зависимость коэффициента прозрачности от толщины d для Be, Al и Pb: 1, 1' – Be, $E_0=7,7$ кэв; 2, 2' – Al, $E_0=19,3$ кэв; 3, 3' – Pb, $E_0=12,7$ кэв. Пунктир – без учета разброса пробегов, сплошные линии – с учетом разброса пробегов

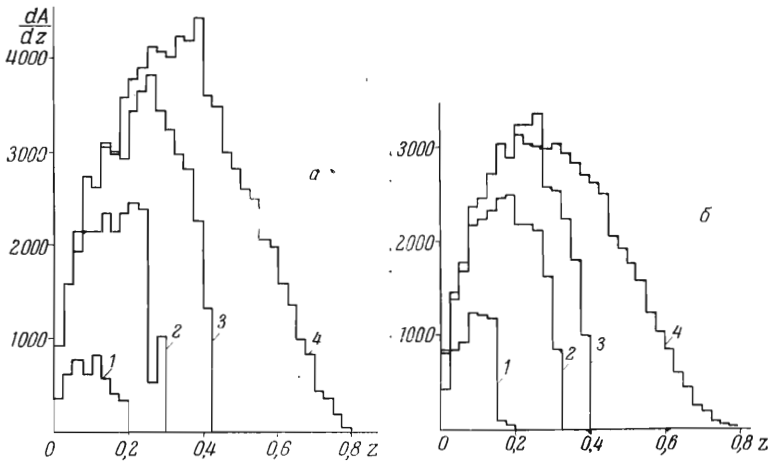


Рис. 7. Распределение поглощенных электронов по глубине для алюминиевых пленок различных толщин (а) – $\theta=0$; б) – $\theta=60^\circ$: 1 – $d=0,2$; 2 – $d=0,3$; 3 – $d=0,4$; 4 – $d=0,9$

интересующей нас области E_0 возникнут существенные качественные изменения вида этого распределения.

Из полярных гистограмм углового распределения электронов, прошедших через слой алюминия при угле падения 60° (рис. 4), видно, что по мере увеличения толщины нарушается симметрия распределения относительно направления падения первичного пучка.

Расчет дает возможность получить также типичное энергетическое распределение прошедших электронов при различных d . Такие кривые приводились нами и ранее [13]. Однако они отличались от эксперимен-

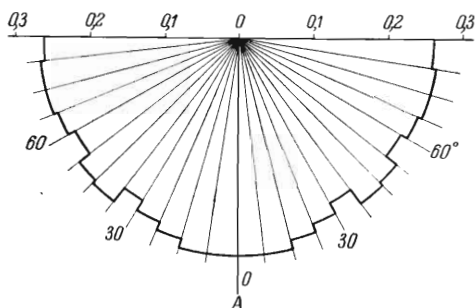
тальных резким обрывом в области больших ϵ (рис. 5, пунктир). Указанное различие связано с тем, что в модели непрерывных потерь не учитываются флуктуации потерь энергии отдельными электронами. Эту особенность неупругого рассеяния можно приближенно учесть, допустив, что первичные электроны имеют различные пробеги R , распределенные

по закону Гаусса с дисперсией, равной, как и в [18], $\left(\frac{\overline{\Delta R}}{R}\right)^2 \approx 2/Q^*$. Ре-

зультат получается в виде суммы решений для отдельных групп первичных электронов, отличающихся друг от друга пробегом R , а их число определяется весовым множителем нормального распределения. Из гистограммы энергетического спектра прошедших электронов, вычисленной с учетом статистического разброса пробегов (рис. 5, сплошная линия), видно, что резкий обрыв в области больших ϵ исчезает и спектр по виду приближается к экспериментальному.

Учет статистического разброса пробегов изменяет и другие характеристики, например, затягивает насыщение толщинных кривых

Рис. 8. Угловое распределение поглощенных электронов в слое Al при $E_0=2,7$ кэв, $\theta=60^\circ$



$R(d)$, изменяет вид кривых прозрачности (рис. 6). В области больших d при учете разброса $T \neq 0$, что обычно наблюдается на опыте для средних [17] и больших E_0 [19].

3. Поглощение. Кроме разнообразных внешних характеристик неупругого рассеяния, расчет позволяет получить также и внутренние характеристики, трудно измеримые экспериментально (особенно в интересующей нас области E_0), например распределение поглощенных электронов по глубине $\frac{dA}{dz}$ при различных толщинах и углах падения θ (рис. 7). Видно, что в большем угле падения «центр тяжести» поглощенных электронов приближается к поверхности. Из нашего расчета следует, что наиболее вероятная глубина поглощения z_0 зависит не только от угла падения θ , но и от толщины слоя d , рода вещества и энергии электронов (рис. 9).

Данные о распределении поглощенных электронов по глубине имеют важное значение при исследовании внедренного в диэлектрик заряда, при записи информации электронным лучом и др. Полученная нами зависимость (z) согласуется с

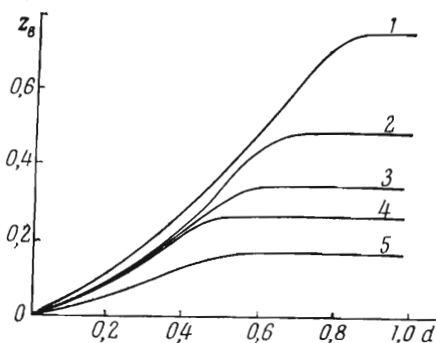


Рис. 9. Зависимость наиболее вероятной глубины поглощения от толщины для Be, Al, Pb: 1 - Be, $E_0=7,7$ кэв, $\theta=0$; 2 - Al, $E_0=19,2$ кэв, $\theta=0$; 3 - Al, $E_0=2,6$ кэв, $\theta=0$; 4 - Al, $E_0=2,6$ кэв, $\theta=60$; 5 - Pb, $E_0=12,7$ кэв, $\theta=0$

* $Q = -\ln(1,16E_0/\mathcal{F})$, где \mathcal{F} - средний потенциал ионизации.

соответствующим пространственным распределением внедренного заряда, измеренного косвенным методом [20].

Нам удалось также получить угловое распределение поглощенных электронов. Электроны поглощаются после многих соударений, когда они растратят почти всю свою избыточную энергию. Поэтому даже при угле падения 60° получилось почти изотропное угловое распределение поглощенных электронов (рис. 8).

Выводы

С помощью методики прямого машинного моделирования и табличных методов счета удалось получить многие дифференциальные характеристики неупругого рассеяния электронов средних энергий в рамках модели непрерывных потерь.

Совпадение этих характеристик с экспериментальными для отражения в исследуемой области и прозрачности в области больших энергий является доводом в пользу допустимости распространения модели непрерывных потерь на область средних энергий.

Это обстоятельство позволяет с определенным доверием отнестись к дифференциальным характеристикам, полученным для прохождения и поглощения, а сама методика расчета может быть использована для учета неупругого рассеяния при анализе различных явлений, таких как вторично-электронная эмиссия, возбуждение мягких рентгеновских лучей, наведенная проводимость, зарядка и пр.

Киевский государственный университет
им. Т. Г. Шевченко
Институт математики
Сибирского отделения Академии наук СССР

Литература

1. Bethe H., Ann. Phys., **5**, 325 (1930).
2. Lewis H. W., Phys. Rev., **78**, 526 (1950).
3. Spenser L. V., Phys. Rev., **98**, 1597 (1955).
4. Berger M. J., Methods in Computational Physics, v. 1. N. Y. Academic Press, 1963, p. 135.
5. Green M., Proc. Phys. Soc., **82**, 204 (1963).
6. Bishop H. E., Proc. Phys. Soc., **85**, 855 (1965); Brit. J. Appl. Phys., **18**, 703 (1967).
7. Murata K., Matsukawa T., Shimizu R., J. Appl. Phys. Japan, **10**, 678 (1971); **10**, 1290 (1971).
8. Shimizu R., Jkuta T., Murata K., J. Appl. Phys., **43**, 4233 (1972).
9. Находкин Н. Г., Остроухов А. А., Романовский В. А., Физика твердого тела, **4**, 1514 (1962); **5**, 41 (1963); **7**, 1256 (1965).
10. Аккерман А. Ф., Никитишев Ю. М., Ботвин В. А., Решение методом Монте-Карло задач переноса быстрых электронов в веществе, «Наука», Алма-Ата, 1972.
11. Косарев Ю. Г., Сб. Вычислительные системы, вып. 30, Новосибирск, 1968, стр. 34.
12. Остроухов А. А., Физика твердого тела, **9**, 1744 (1967); **10**, 2105 (1968).
13. Головяшкина Л. В., Находкин Н. Г., Сб. Вычислительные системы, вып. 52, Новосибирск, 1972, стр. 5.
14. Kanter H., Brit. J. Appl. Phys., **15**, 555 (1964).
15. Kanter H., Ann. Phys., **20**, 144 (1957).
16. Крысько Ю. Н., Мельник П. В., Находкин Н. Г., Черный Б. С., Укр. физ. ж., **15**, 808 (1971).
17. Cosslett V. E., Thomas R. N., Brit. J. Appl. Phys., **15**, 883 (1964); **15**, 1283 (1964); **16**, 779 (1965).
18. Остроухов А. А., Находкин Н. Г., Радиотехника и электроника, **10**, 522 (1965).
19. Seliger H. H., Phys. Rev., **100**, 1029 (1955).
20. Бутенко А. Д., Находкин Н. Г., Немцев В. П., Ж. научн. и прикл. фототгр. и кинематогр., **16**, 59 (1971).