

Костенко С.А., Шкилько А.М.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПЕРЕНОСА ЭЛЕКТРОНОВ НИЗКИХ ЭНЕРГИЙ

Новые важные прикладные задачи электронной спектро- и микроскопии, нано- и микроэлектроники, микродозиметрии, радиационной химии и т.п. вызвали интерес к исследованиям прохождения через вещество электронов низких энергий (экзоэлектронов) [1]. Акцент в этих исследованиях делается на развитие теоретических методов расчёта взаимодействий электронов с атомами твердотельных объектов и построение адекватных моделей переноса электронов в веществе. Такое внимание к теоретической части проблемы обусловлено трудностями проведения эксперимента: высокие требования к разрешающей способности аппаратуры, невозможность прямого измерения всех параметров тормозящего пучка, необходимость иметь однородные тонкие (десятки нанометров) плёнки различных веществ и т.п.

Применительно к экзоэлектронной эмиссии решается задача разработки в рамках определённых модельных представлений методов расчёта основных характеристик полей частиц вне и внутри вещества при прохождении через него пучка низкоэнергетических (≤ 3 кэВ) электронов.

Одним из методов решения таких важных задач является метод Монте-Карло – статистический метод моделирования электронных траекторий в веществе [2 – 3]. В настоящее время разработано большое число схем расчёта этим методом задач, связанных с прохождением низкоэнергетических электронов. Обилие схем, часто имеющих узкую и не всегда чётко установленную область применения, порождает трудности при выборе схемы, целесообразной для проведения конкретных расчётов.

В работе проанализированы методы получения согласованного набора исходной информации и анализ основных расчётных схем метода Монте-Карло, устанавливаются области их применимости и реализации по использованию для конкретных задач.

При моделировании методом Монте-Карло траекторий низкоэнергетических электронов в твёрдом теле используются три основные схемы:

1. индивидуальных взаимодействий;
2. непрерывного замедления;
3. укрупнённых соударений.

Многие другие схемы моделирования являются модификациями или комбинациями этих трёх основных схем.

Схема индивидуальных соударений даёт наиболее адекватное описание прохождения электронов низких энергий через вещество. В соответствии с известными физическими моделями рассеиваемые электроны могут испытывать как парные взаимодействия с ядрами (упругие соударения), с электронами внутренних оболочек (ионизация) и с валентными электронами (электрон-дырочное возбуждение), так и коллективные взаимодействия с электронным газом (плазменное возбуждение). Построение траектории экзоелектрона по схеме 1 ведётся детальным моделированием каждого акта взаимодействия электрона с атомами вещества мишени. Основной недостаток данной схемы – большие затраты машинного времени для получения статистически достоверных результатов моделирования. Однако бурное развитие в последние годы вычислительной техники и приёмов уменьшения дисперсии значительно ослабило это ограничение и позволило создать мощные моделирующие программы, использующие схему 1 для решения различных прикладных задач.

Схема непрерывного замедления (2) привлекает своей простотой, что и объясняет её широкое распространение! Для моделирования траекторий электронов по схеме 2 требуется значительно меньше исходной информации. Применение схемы непрерывного замедления позволяет создать очень компактные программы и в несколько раз, по сравнению со схемой 1, снизить затраты машинного времени.

Достоинством схемы укрупнённых соударений 3, разработанных на первом этапе для решения задач прохождения электронов высоких энергий, являются незначительный объём исходной информации и минимальные затраты машинного времени на получение статистически обоснованных результатов.

Анализируя опубликованные в литературе результаты сравнения экспериментальных данных с результатами моделирования прохождения электронов по схемам 1, 2, 3, можно сделать вывод об их применимости. Схема 1 – индивидуальных соударений – обеспечивает достоверное моделирование электронных траекторий.

Применение схем 2 и 3 существенно ограничено и неприменимо для вычисления дифференциальных характеристик и ограниченно применимо для вычисления интегральных характеристик.

Литература:

1. Шкилько А.М. Экзоэмиссионная диагностика поверхности конструкционных материалов. – Харьков-Луганск, Ноулидж, 2009. – 248 с.
2. Аккерман А.Ф., Никитушев Ю.М., Ботвин В.А. Решение методом Монте-Карло задач переноса быстрых электронов в веществе. – Алма-Ата, Наука, 1972. – 163 с.
3. Ichimura S., Fratama M., Shimizu R. Monte-Carlo Calculation approach to Quantitative Auger Electron spectroscopy // I. Appl. Phys. 1980, 51, № 5. – P. 2853–2860.