

Министерство образования и науки Российской Федерации  
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение  
высшего образования  
«Волгоградский государственный технический университет»

*На правах рукописи*

Чан Хай Кат

**КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ МЕТОДОМ  
МОНТЕ–КАРЛО ПРОЦЕССОВ ПЕРЕНОСА ЭЛЕКТРОНОВ В  
ТВЕРДОТЕЛЬНЫХ СТРУКТУРАХ В НАНОЭЛЕКТРОНИКЕ**

01.04.04 – Физическая электроника

Диссертация

на соискание ученой степени кандидата

физико-математических наук

Научный руководитель:

Профессор, доктор физ.-мат. наук

Смоляр Владимир Алексеевич

Волгоград 2016

# ОГЛАВЛЕНИЕ

<b>ВВЕДЕНИЕ</b>	<b>5</b>
<b>1 Общая схема моделирования движений электронов методом Монте–Карло</b>	<b>13</b>
1.1 Множественная модель рассеяния . . . . .	15
1.2 Модель непрерывного замедления . . . . .	20
Выводы по главе . . . . .	22
<b>2 Моделирование упругих соударений электронов с атомами</b>	<b>25</b>
2.1 Упругое рассеяние по теории Мотта . . . . .	25
2.2 Моделирование с использованием модифицированной по Мотту формулы Резерфорда–Бете . . . . .	26
Выводы по главе . . . . .	31
<b>3 Моделирование неупругих соударений электронов с атомами по теории Гризинского</b>	<b>33</b>
3.1 Формула Гризинского . . . . .	33
3.2 Сравнение с расчетом по экспериментально измеренной диэлектрической функции потерь . . . . .	47
3.3 Угловое распределение дифференциального сечения неупругого рассеяния по теории Гризинского . . . . .	50
3.4 Моделирование движения электронов методом Монте–Карло с учетом теории Гризинского . . . . .	51
Выводы по главе . . . . .	54
<b>4 Моделирование неупругих соударений электронов с атомами с использованием модифицированной формулы Бете</b>	<b>55</b>

4.1	Аналитическая аппроксимация средней энергии возбуждения на основе модели атома Томаса–Ферми . . . . .	55
4.1.1	Введение . . . . .	55
4.1.2	Общие положения . . . . .	56
4.1.3	Оценка средней энергии возбуждения методом Томаса–Ферми . . . . .	58
4.2	Аналитическая формула тормозной способности Бете с эффективным атомным номером и эффективным ионизационным потенциалом . . . . .	64
4.2.1	Экстраполяция формулы Бете на область малых и средних энергий электронов . . . . .	64
4.2.2	Вычисление эффективного числа взаимодействующих электронов и средней энергии ионизации . . . . .	66
	Выводы по главе . . . . .	73
<b>5</b>	<b>Решение задач о прохождении электронов через вещество методом Монте–Карло</b>	<b>74</b>
5.1	Вероятность выхода электронов из поверхности образцов . . . . .	75
5.1.1	Модель и алгоритм . . . . .	75
5.1.2	Результаты . . . . .	76
5.2	Интегральная функция выхода для электронов . . . . .	80
5.2.1	Модель и алгоритм . . . . .	80
5.2.2	Сравнение с экспериментальными данными . . . . .	81
5.3	Коэффициент обратного рассеяния и энергетический спектр обратного рассеяния электронов . . . . .	82
5.3.1	Модель и алгоритм . . . . .	82
5.3.2	Сравнение с экспериментальными данными . . . . .	87
	Выводы по главе . . . . .	92

**ЗАКЛЮЧЕНИЕ** 94

**СПИСОК ИСПОЛЬЗУЕМЫХ ИСТОЧНИКОВ** 96

# ВВЕДЕНИЕ

**Актуальность исследования.** Знания о взаимодействии электронов с атомами вещества и процессе прохождения электронов через вещество необходимы для понимания физических процессов в современных электронно-эмиссионных методах анализа поверхности таких, как рентгеноспектральный микроанализ, Оже-спектроскопия, рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия, спектрометрия электронной эмиссии, метод рентгеновских стоячих волн, метод профилирования состава по глубине. Применение этих методик позволяет определить химический состав, размеры неоднородностей (толщины слоев), атомную структуру, электронное строение и прочие характеристики образца с субатомным разрешением. Помимо использования в диагностике, поток электронов широко применяется для изменения свойств поверхности. Примером такого рода может служить электронно-лучевая литография, которая широко используется при изготовлении интегральных схем. Применение потока электронов позволяет создавать структуры с наименьшими размерами активных областей.

Математическое моделирование процессов взаимодействия электронов с веществом имеет большое значение во многих приложениях. В частности, в рамках задач прохождения электронов через вещество и рентгеноэлектронной эмиссии требуется построить траектории электронов в веществе методом Монте–Карло для рассмотрения характеристик столкновения электронов с атомами, также рождения вторичных электронов и рентгеновского излучения. Этот статистический метод позволяет моделировать на компьютере случайные процессы рассеяния и прохождения электронов в твердом теле и получать практически любую интересующую исследователя информацию, связанную как с самим электронным пучком, так и с различными сопровож-

дающими эффектами.

Процесс прохождения электронов через вещество носит сложный характер и определяется прежде всего упругим и неупругим столкновениями с атомами вещества. Упругое рассеяние приводит к изменению направления движения электрона без потери энергии. Неупругое рассеяние происходит с изменением внутренней структуры атома, сопровождается потерей энергии электрона. Все процессы переноса носят вероятностный характер и описываются через соответствующие эффективные поперечные сечения. Поэтому исходными величинами в любой имитационной модели должны быть сечения того или иного взаимодействия электрона с атомом вещества. Через сечения вычисляются вероятности любого возможного процесса рассеяния.

В настоящее время сечения упругого рассеяния определяются по теории Мотта на основе решения волнового уравнения Дирака с включением обменного и поляризованного взаимодействия электрона с атомами в веществе. Детальное исследование можно найти в работах [1–5]. В методе Монте-Карло часто используются табличные данные, подготовленные расчетами по теории. Промежуточные значения найдены путем интерполяции. Однако скорость вычисления остается ограниченной из-за больших объемов таблиц данных. В работах [6, 12] предложен метод модификации формулы Резерфорда-Бете так чтобы полное и первое транспортное сечение совпадали с вычисленными по релятивистской теории Мотта. Оказывается, что формула Резерфорда-Бете хорошо подходит для моделирования по Монте-Карло упругого рассеяния электронов на атомах, так как интеграл от этой функции имеет аналитическое решение.

Неупругое рассеяние электрона на атоме сопровождается изменением внутреннего состояния последнего. При этом налетающий электрон теряет часть своей энергии. Существует три подхода к вычислению процесса энергетиче-

ческих потерь, обусловленных неупругим рассеянием, сопровождающимся ионизацией. Первый подход (так называемое приближение непрерывного замедления) основан на предположении, что электрон теряет свою энергию непрерывным образом по закону Бете [7]. Второй подход предложенный Гризинским [8] (назовём его дискретным) предназначен для определения величины теряемой энергии в момент неупругого парного столкновения налетающего электрона с одним из электронов атома. Третий подход основан на моделировании процесса неупругого рассеяния по экспериментально измеренным диэлектрическим функциям  $\varepsilon(k, \omega)$ , где  $k$  — волновое число,  $\omega$  — частота [9].

В работе [9] дифференциальное сечение рассчитывалось на основе диэлектрического подхода по экспериментально измеренным оптическим данным - зависимостям показателя преломления и коэффициента поглощения от энергии кванта света. Эти данные отобраны и систематизированы в сборнике Палика [10]. Однако из-за конечного числа измеренных оптических данных как по составу веществ, так и по области энергий, этот подход сильно ограничен. В нашей работе мы будем использовать теорию Гризинского, позволяющую вычислить дифференциальное сечение неупругого рассеяния на атомах, если известны энергии его электронных оболочек [8]. Эта теория не имеет таких жёстких ограничений по составу веществ, поскольку энергетические спектры атомов в веществах хорошо изучены и по ним имеются надёжные данные [11]. Кроме того, она даёт больше детальной информации о соударении электронов с атомами, так как можно вычислить вклад в рассеяние каждой электронной оболочки атома.

**Целью исследований** является исследование процессов переноса электронов в твердотельных структурах в наноэлектронике методом Монте-Карло.

Для достижения этой цели были поставлены **следующие задачи**:

1. Модификация формулы Резерфорда–Бете так чтобы полное и первое транспортное сечение совпадали с вычисленными по релятивистской теории Мотта.
2. Разработать алгоритм расчёта характеристик неупругого рассеяния: дифференциального сечения, полного сечения, средней длины свободного пробега, средней потери энергии каждого столкновения и тормозной способности электронов при энергиях от 10 эВ до 100 кэВ в конденсированном веществе по квантово-механической теории рассеяния частиц на атоме Гризинского.
3. Модификация формулы тормозной способности Бете к данным, вычисленной по теории Гризинского.
4. Разработать алгоритм моделирования траектории электронов в веществе с учётом возбуждения вторичных электронов. Создавать новые методы с использованием модифицированных функций для повышения скорости вычисления траектории.
5. Решение задач о прохождении электронов через вещество методом Монте–Карло, включая задачи о вероятности выхода, функции выхода, коэффициенте обратного рассеяния, энергетическом спектре обратного рассеяния, разброс электронов по пройденной пути и по потерянной энергии.

**Научная новизна работы.** В диссертации получены следующие результаты, характеризующиеся научной новизной:

1. Модифицированная формула Резерфорда–Бете с коэффициентом экранирования, применимая в моделировании упругого столкновения электронов с атомами, подогнана по надёжным данным упругого рассеяния по теории Мотта.

2. Вычислены характеристики неупругого рассеяния при энергиях от 10 эВ до 100 кэВ в конденсированном веществе по квантово-механической теории рассеяния частиц на атоме Гризинского, при котором сечение неупругого рассеяния вычислено для отдельной оболочки и даёт больше детальной информации о соударении электронов с атомами.
3. Моделирование столкновения электрона с атомами по множественной модели рассеяния, основанной на формуле Резерфорда–Бете и на характеристиках, вычисленных по теории Гризинского, может быть проведено для почти всех простых и сложных веществ, принимая во внимание появление вторичных электронов.
4. Коэффициенты для прокламационной формулы тормозной способности Бете вычислены на основе теории Гризинского. Аппроксимация выполняется по данным о структуре оболочек атомов и пригодна для веществ любого химического состава.
5. Задачи о прохождении электронов через вещество, включая задачи о вероятности выхода, функции выхода, коэффициенте обратного рассеяния, энергетическом спектре обратного рассеяния, разброс электронов по пройденной пути и по потерянной энергии решаются методом моделирования, построенным по выше изложению.

**Научная и практическая ценность работы** заключается в том, что теоретические исследования в работе характеристики рассеяния являются основой для понимания физических процессов переноса электронов в современных электронно-эмиссионных методах анализа поверхности таких, как Оже-спектроскопия, рентгеноэлектронная спектроскопия, а также понимания электроннопучковых технологий.

**Методы исследования.** В работе использовались методы математиче-

ской физики, аналитические и численные методы интегрирования дифференциальных уравнений, статистические методы расчёта и обработки данных, современные методы вычислительной математики и программирования.

### **Положение, выносимые на защиту:**

1. Общая схема моделирования движения электронов в веществе. Множественная модель рассеяния и модель непрерывного замедления.
2. Алгоритм нахождения угла рассеяния при упругом столкновении с помощью модифицированной формулы Резерфорда–Бете.
3. Способ вычисления характеристик неупругого рассеяния электронов на атоме, узнав энергетическую структуру атома. Предложение алгоритма неупругого столкновения с учётом рождения вторичных электронов.
4. Способ подгонки коэффициентов формулы Бете так чтобы тормозные способности, вычисленные по полученной формуле, приближаются к данным, вычисленным по модели Гризинского.
5. Модели и алгоритмы расчетов для моделирования физических процессов. Сравнения полученных результатов с экспериментами.

**Апробация результатов.** Результаты диссертационного исследования докладывались на всероссийской научной конференции студентов-физиков и молодых ученых «ВНКСФ-22» (Ростов на Дону, 2016 г.), на VII Международных семинарах «Компьютерное моделирование электромагнитных процессов в физических, химических и технических системах» (Воронеж, ВГТУ, 2016 г.), на всероссийской научно-технической конференции студентов, аспирантов и молодых ученых «Научная сессия ТУСУР–2013» (Томск, ТУСУР, 2013 г.), на X, XIII, XIV, XV Международных семинарах «Физико-математическое

моделирование систем» (Воронеж, ВГТУ, 2013, 2014, 2015 г.), на 49-й внутривузовской научной конференции ВолгГТУ (Волгоград, ВолгГТУ, 2012 г.), на международной научной – практической конференции «Биология, химия, физика: вопросы и тенденции развития» (Новосибирск, 2012 г.), на IX молодежной международной научной – практической конференции «Интеллектуальный потенциал XXI века: ступени познания» (Новосибирск, 2012 г.).

**Публикации.** Научные результаты работы опубликованы в следующих рецензируемых журналах: «Известия ВолгГТУ. Серия: Электроника, измерительная техника, радиотехника и связь», сборники тезисов и материалов конференций. Всего 16 работ, из них 4 статьи в рецензируемых журналах, рекомендованном ВАК РФ.

**Соответствие паспорту научной специальности.** Область исследования соответствует паспорту специальности 01.04.04 «Физическая электроника», а именно

пункт 1 – «Эмиссионная электроника, включая процессы на поверхности, определяющие явления эмиссии, эмиссионную спектроскопию и все виды эмиссии заряженных частиц»,

пункт 4 – «Физические явления в твердотельных микро- и наноструктурах, молекулярных структурах и кластерах; проводящих, полупроводниковых и тонких диэлектрических пленках и покрытиях»,

пункт 6 – «Изучение физических основ плазменных и лучевых (пучковых) технологий, в том числе модификации свойств поверхности, нанесение тонких пленок и пленочных структур».

**Личный вклад автора.** Основные положения диссертации опубликова-

ны в соавторстве с научным руководителем. В публикациях [13–19] совместно с научным руководителем сформулированы задачи исследования и проанализированы результаты вычислительного моделирования. Научные результаты [20–22] получены лично автором.

**Структура и объем работы.** Диссертация состоит из введения, 5 глав, заключения, библиографии. Работа изложена на 102 страницах машинописного текста и включает 31 рисунков и 6 таблиц. Библиография включает 49 наименований.

# Глава 1    Общая схема моделирования движений электронов методом Монте–Карло

Математическое моделирование процессов взаимодействия электронов с веществом имеет большое значение во многих приложениях. В частности, в рамках задач прохождения электронов через вещество и рентгеноэлектронной эмиссии требуется построить траектории электронов в веществе методом Монте-Карло для рассмотрения характеристик столкновения электронов с атомами, также рождения вторичных электронов и рентгеновского излучения. Этот статистический метод позволяет моделировать на ЭВМ случайные процессы рассеяния и прохождения электронов в твердом теле и получать практически любую интересующую исследователя информацию, связанную как с самим электронным пучком, так и с различными сопровождающими эффектами.

В настоящее время существует большое число публикаций о моделировании переноса электронов через вещество методом Монте-Карло. Все процессы переноса носят вероятностный характер и описываются через соответствующие эффективные поперечные сечения. Поэтому исходными величинами в любой имитационной модели должны быть сечения того или иного взаимодействия электрона с атомом вещества. Через сечения вычисляются вероятности любого возможного процесса рассеяния.

В данной работе мы используем упругое дифференциальное сечение по Мотту и неупругое дифференциальное сечение по Гризинскому. Упругое дифференциальное сечение по Мотту подробно рассмотрено в работе [5]. Неупругое дифференциальное сечение по Гризинскому дает нам детальную информацию для моделирования вылетающих от атома вторичных электронов, так как оно рассматривает ионизацию отдельных оболочек атома и дает значение

потерь энергии. Алгоритмы, приведенные в этой работе, немного отличаются от алгоритмов в других работах. Они основаны на характеристиках рассеяния по теории Гризинского: угловое рассеяние вычислено не только для упругих но и для неупругих соударений; моделирование движения электронов учитывает генерацию вторичных электронов.

При моделировании распространения электрона в твёрдом теле методом Монте-Карло считается, что [23]

- электрон движется по траектории, которая представляет собой ломаную линию с изломами, соответствующими рассеянию на уединённых атомах
- атомы, на которых происходит рассеяние, считаются не подвижными

Предположим, что начальное положение столкновения —  $(x_n, y_n, z_n)$  и начальное направление движения —  $(\theta_n, \phi_n)$ . Наша задача — это нахождение следующего положения столкновения  $(x_{n+1}, y_{n+1}, z_{n+1})$  и нового направления движения  $(\theta_{n+1}, \phi_{n+1})$ . Для этого надо найти расстояние до следующего положения столкновения и угол рассеяния электрона в этом месте.

Рассмотрим поток электронов, проходящих через площадь  $1\text{см}^2$ . При прохождении длины  $dl$  этот поток пронизает объём  $(1\text{см}^2)dl$ . В этом объёме поток электронов встретит  $n \cdot (1\text{см}^2) \cdot dl$  атомов, где  $n$  — концентрация атомов вещества. Вероятность столкновения с одним из атомов одной из электронов при прохождении слоя  $dl$  равна

$$\frac{\sigma}{1\text{см}^2} n \cdot (1\text{см}^2) \cdot dl = n\sigma dl. \quad (1.1)$$

где  $\sigma$  — полное сечение рассеяния.

Обозначим через  $N(l)$  величину потока неотклоненных электронов на глубине  $l$  внутри вещества. Согласно (1.1) убыль этого потока при прохождении слоя  $l, l + dl$  будет

$$\frac{dN(l)}{dl} = -N(l)n\sigma. \quad (1.2)$$

Отсюда находим

$$N(l) = N_0 e^{-n\sigma l}. \quad (1.3)$$

Стало быть, величина

$$\omega(l) = e^{-n\sigma l} \quad (1.4)$$

есть вероятность пройти путь  $dl$  без столкновения. Здесь  $\omega(l)$  может принимать любое число от 0 до 1. Следовательно, расстояние до следующего столкновения электрона равно

$$l = -\frac{1}{n\sigma} \ln(\omega(l)) = -\frac{1}{n\sigma} \ln \xi, \quad (1.5)$$

где  $\xi$  — случайное число от 0 до 1.

Следующие шаги схемы моделирования зависят от выбранных методов Монте–Карло, используемых в настоящей работе:

- множественная модель рассеяния;
- модель непрерывного замедления.

## 1.1 Множественная модель рассеяния

Схема метода Монте–Карло по множественной модели показана на рисунке 1.

По множественной модели моделирования, полное сечение рассеяния равно сумме полного упругого и неупругого рассеяния:

$$\sigma = \sigma_{el} + \sigma_{in}.$$

Сечение упругого  $\sigma_{el}$  и сечение неупругого рассеяния  $\sigma_{in}$  вычисляются путем интегрирования дифференциальных сечений упругого и неупругого рассеяния:

$$\sigma_{el} = 2\pi \int_0^\pi \frac{\partial \sigma_{el}}{\partial \Omega} \sin \vartheta d\vartheta, \quad (1.6)$$

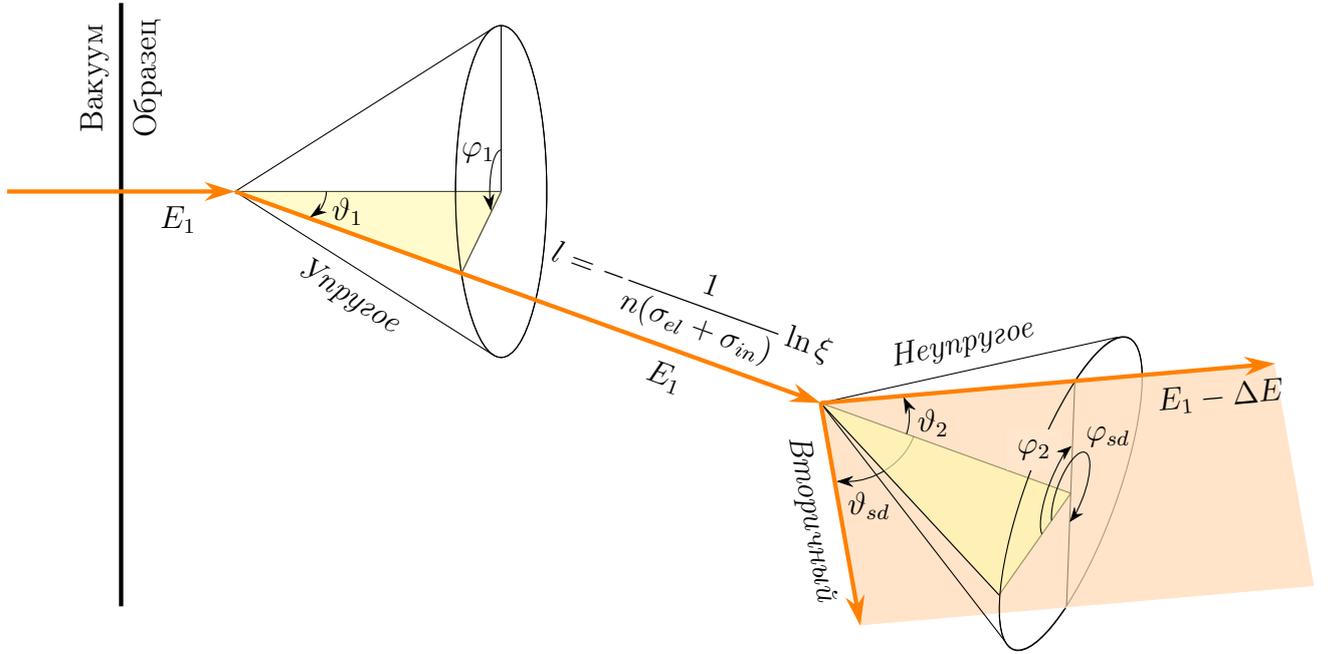


Рисунок 1 – Схема метода Монте-Карло по множественной модели рассеяния

$$\sigma_{in} = \int_{E_{min}}^{E_{max}} \frac{\partial \sigma_{in}}{\partial \Delta E} d\Delta E. \quad (1.7)$$

Дифференциальные сечения  $\frac{d\sigma_{el}}{d\Omega}$  и  $\frac{\partial \sigma_{in}}{\partial \Delta E}$  конкретно определяются в следующих изложениях, когда рассмотрим свойства упругого рассеяния по Мотту в главе 2 и неупругого рассеяния по теории Гризинского в главе 3.

Вероятности упругого и неупругого рассеяний определяются выражениями

$$p_{el} = \frac{\sigma_{el}}{\sigma_{el} + \sigma_{in}}, \quad (1.8)$$

$$p_{in} = 1 - p_{el}. \quad (1.9)$$

Чтобы определить тип рассеяния, возьмём случайное число  $\xi \in [0, 1]$ . Если  $\xi < p_{el}$  считаем, что столкновение упругое. А если  $\xi > p_{el}$ , столкновение неупругое.

Если столкновение – упругое, направление  $(\vartheta, \varphi)$  рассеянного электрона определяется методом, изучаемым в главе 2.

В случае неупругого столкновения, важнейшим вопросом является какую энергию падающий электрон теряет. Потерянная энергия  $\Delta E$  рассчитывается с помощью модели столкновения по теории Гризинского, подробно рассмотренной в главе 3. После того, что потерянная энергия  $\Delta E$  известна, переходим к расчету углы рассеяния  $(\vartheta, \varphi)$ .

На рисунке 2 показана схема неупругого столкновения электрона с электроном атоме, принимая во внимание появление вторичного электрона. При этом неупругое рассеяние считается абсолютным ударом между одинаковыми частицами. Справедлив закон сохранения импульса:

$$\mathbf{p} = \mathbf{p}_s + \Delta \mathbf{p}.$$

Применяя теорему косинусов имеем

$$|\Delta \mathbf{p}|^2 = |\mathbf{p}|^2 + |\mathbf{p}_s|^2 - 2|\mathbf{p}||\mathbf{p}_s| \cos \vartheta, \quad (1.10)$$

где  $\mathbf{p}$  — импульс падающего электрона,  $\mathbf{p}_s$  — импульс рассеянного электрона,  $\Delta \mathbf{p}$  — переданный импульс,  $\vartheta$  — полярный угол рассеяния. Используя

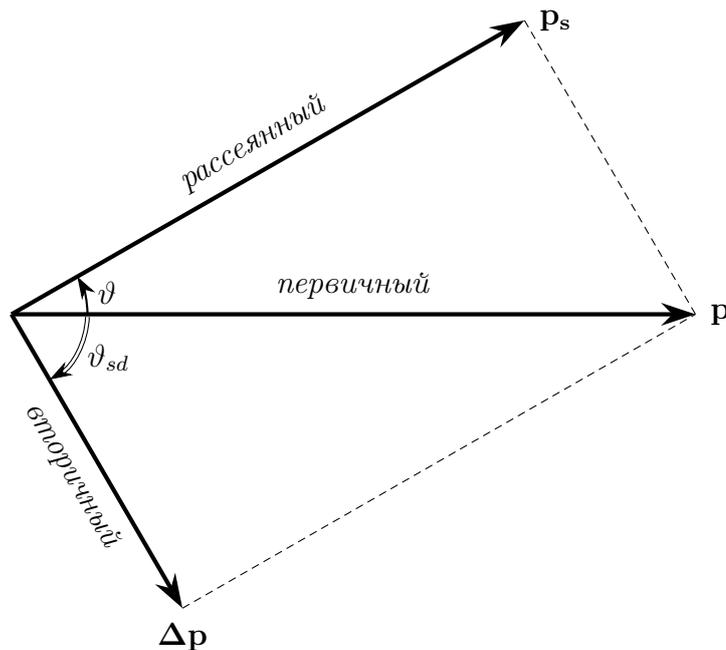


Рисунок 2 – Схема неупругого рассеяния электрона на атоме:  $\mathbf{p}$  — импульс падающего электрона,  $\mathbf{p}_s$  — импульс рассеянного электрона,  $\Delta \mathbf{p}$  — переданный импульс

соотношение  $E = p^2/2m$  получаем

$$\Delta E = E + E_s - 2 \left| \sqrt{EE_s} \right| \cos \vartheta. \quad (1.11)$$

Учитывая, что  $\Delta E = E - E_s$ , имеем

$$\Delta E = E + (E - \Delta E) - 2 \left| \sqrt{E(E - \Delta E)} \right| \cos \vartheta.$$

Выполнив простые преобразования, получим

$$\Delta E = E \sin^2 \vartheta. \quad (1.12)$$

Отсюда получаем явную формулу для полярного угла  $\vartheta$ :

$$\vartheta = \arcsin \sqrt{\frac{\Delta E}{E}}. \quad (1.13)$$

Азимутальный угол  $\varphi$  равномерно распределяет от 0 до  $2\pi$ :

$$\varphi = 2\pi\xi, \quad (1.14)$$

где  $\xi$  — случайное число от 0 до 1.

Здесь полярный угол  $\vartheta$  и азимутальный угол  $\varphi$  выбираем относительно системы отчета, где предыдущее направление движения подающего электрона совпадает с направлением оси  $Oz$ . Чтобы получить углы, определяющие рассеянное направление движения подающего электрона в лабораторной системе, воспользуемся формулами преобразования [24]

$$\begin{aligned} \cos \theta_{n+1} &= \cos \theta_n \cos \vartheta - \sin \theta_n \sin \vartheta \cos \varphi, \\ \sin(\phi_{n+1} - \phi_n) &= \sin \vartheta \sin \varphi / \sin \theta_{n+1}, \\ \cos(\phi_{n+1} - \phi_n) &= (\cos \vartheta - \cos \theta_n \cos \theta_{n+1}) / (\sin \theta_n \sin \theta_{n+1}). \end{aligned} \quad (1.15)$$

Известно нам направление движения  $(\theta_{n+1}, \phi_{n+1})$  и расстояние до следующего положения столкновения  $l$ , мы найдем новое следующее положение столкновения:

$$\begin{aligned} x_{n+1} &= x_n + l \sin \theta_{n+1} \cos \phi_{n+1}, \\ y_{n+1} &= y_n + l \sin \theta_{n+1} \sin \phi_{n+1}, \\ z_{n+1} &= z_n + l \cos \theta_{n+1}. \end{aligned} \quad (1.16)$$

Энергия подающего электрона после удара убывает на  $\Delta E$ , становится  $E - \Delta E$ . Процессы столкновения происходят до того, что энергия  $E$  меньше чем энергии ионизации атомов вещество.

Вторичные электрон появляются в том случае, когда переданная энергия  $\Delta E$ , поглощаемая электроном в атоме, превышает энергию связи. Начальное положение вторичного электрона считается положением столкновения с первичным электроном.

$$\begin{aligned}x_{sd} &= x_n, \\y_{sd} &= y_n, \\z_{sd} &= z_n.\end{aligned}\tag{1.17}$$

По закону сохранения импульса, векторы  $\mathbf{p}$ ,  $\mathbf{p}_s$  и  $\Delta\mathbf{p}$  должны быть компланарными. Кроме того, вектора  $\mathbf{p}_s$  и  $\Delta\mathbf{p}$  расположены напротив друг друга через вектор  $\mathbf{p}$ . В сочетании с рисунком 1, приходим к выводу об соотношении между азимутальными углами вторичного и первичного электронов:

$$\varphi_{sd} = \pi + \varphi.\tag{1.18}$$

где  $\varphi$  известно по (1.14).

Из соотношения (1.12) имеем

$$\sin \vartheta = \sqrt{\frac{\Delta E}{E}} = \frac{|\Delta\mathbf{p}|}{|\mathbf{p}|}.$$

Это говорит о том, что направление движения вторичного электрона перпендикулярно к направлению рассеяния первичного:  $\Delta\mathbf{p} \perp \mathbf{p}_s$ . Отсюда следуем соотношение между полярными углами вторичного и первичного электронов:

$$\begin{aligned}\sin \vartheta_{sd} &= \cos \vartheta, \\ \cos \vartheta_{sd} &= \sin \vartheta.\end{aligned}\tag{1.19}$$

Углы  $(\vartheta_{sd}, \varphi_{sd})$  определяются относительно текущего направления первичного электрона  $(\theta_n, \phi_n)$ . Для расчета в лабораторной системе они преобразу-

ются формулами, аналогичными с (1.15):

$$\begin{aligned}\cos \theta_{sd0} &= \cos \theta_n \cos \vartheta_{sd} - \sin \theta_n \sin \vartheta_{sd} \cos \varphi_{sd}, \\ \sin(\phi_{sd0} - \phi_n) &= \sin \vartheta_{sd} \sin \varphi_{sd} / \sin \theta_{sd0}, \\ \cos(\phi_{sd0} - \phi_n) &= (\cos \vartheta_{sd} - \cos \theta_n \cos \theta_{sd0}) / (\sin \theta_n \sin \theta_{sd0}).\end{aligned}\tag{1.20}$$

Вторичный электрон будет двигаться с законами первичного электрона.

## 1.2 Модель непрерывного замедления

Схема метода Монте–Карло по модели непрерывного замедления показана на рисунке 3.

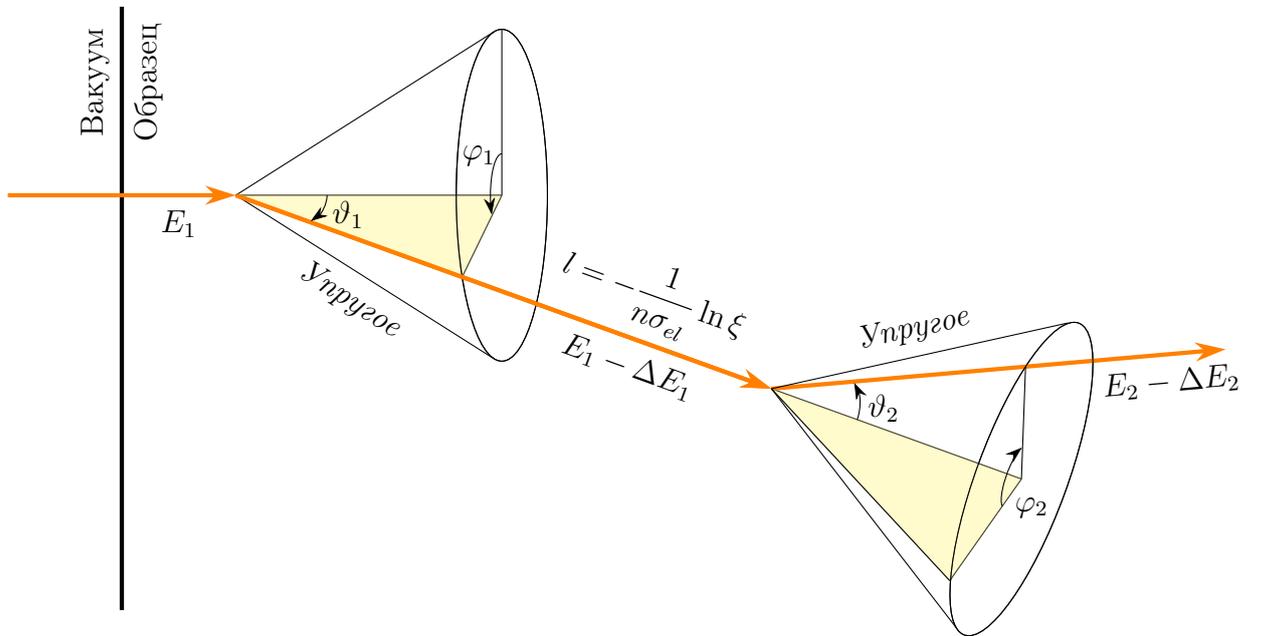


Рисунок 3 – Схема метода Монте–Карло по модели непрерывного замедления

По модели непрерывного замедления, электрон непрерывно теряет свою энергию вдоль траектории. Изломы ломаной линии траектории электрона описывают только положения, где происходят упругие столкновения. При этом полное сечение рассеяния состоит только упругое слагаемое. Расстояние между изломами столкновения (1.5) становится

$$l = -\frac{1}{n\sigma_{el}} \ln \xi.\tag{1.21}$$

где  $\xi$  — случайное число от 0 до 1. Полное сечение  $\sigma_{el}$  определено также по интегралу дифференциального упругого рассеяния (1.6), изучаемого в главе 2. Глава 2 также предоставляет оптимальный метод для вычисления углов рассеяния  $(\vartheta, \varphi)$ . После этого углы рассеяния  $(\vartheta, \varphi)$  преобразуются системой формул (1.15) для получения канонического направления в лабораторной системе расчета. Далее с помощью формул (1.16) новое положение столкновения определяется.

Процесс потери энергии характеризуется функцией, называемой тормозной способностью. Эта функция указывает количество энергии, теряемой частица за счет возбуждения и ионизации атомов вещества в слое единичной толщины. Знание о функции тормозной способности позволяет оценивать потерю энергии, происходящую во время движения между двумя последовательными упругими столкновениями

$$\Delta E = \frac{dE}{ds} \cdot l, \quad (1.22)$$

с учетом того, что функция  $\frac{dE}{ds}$  мало изменяется вдоль этот отрезок длины, где  $l$  — расстояние между этим столкновениями, полученное по формуле (1.21).

Теория Гризинского, рассматриваемая в главе 3, позволяет сделать массив данных для тормозной способности, представленный как функция по энергии. Однако, существует классический подход, который описывает тормозную способность с помощью аналитической функцией, называемой функция Бете. Такая аналитическая функция позволяет исследовать процесс транспорта частиц более физически, а также помогает компьютеру работать быстрее. Недостатком функции Бете, как показано в Главе 4, является низкая точность в области энергии, сравнимой с энергией связи электронов в атомах. При энергии ниже среднего ионизационного потенциала, формула Бете математически не применима. По этой причине чтобы уточнить функцию

Бете, также для синхронизации с тормозной способностью, полученной по теории Гризинского, подгоним функцию Бете по результату, рассчитанному по модели Гризинского. Все эти вопросы рассматриваются в Главе 4.

## **Выводы по главе**

Блок-схемы, описывающие процессы построения траектории электронов, представлены на рисунках 4 и 5. По этим алгоритмам, набор 4 параметров: начальная энергия  $E_0$ , начальное положение  $(x_0, y_0, z_0)$ , начальное направление  $(\theta_0, \phi_0)$  и  $E_{min}$  определяет траекторию одного электрона. Конкретные значения  $E_{min}$  зависят от каждой задачи и рассматриваются в Главе 5. На блок-схемах также указываются вопросы, которые должны быть выяснены в следующих главах.



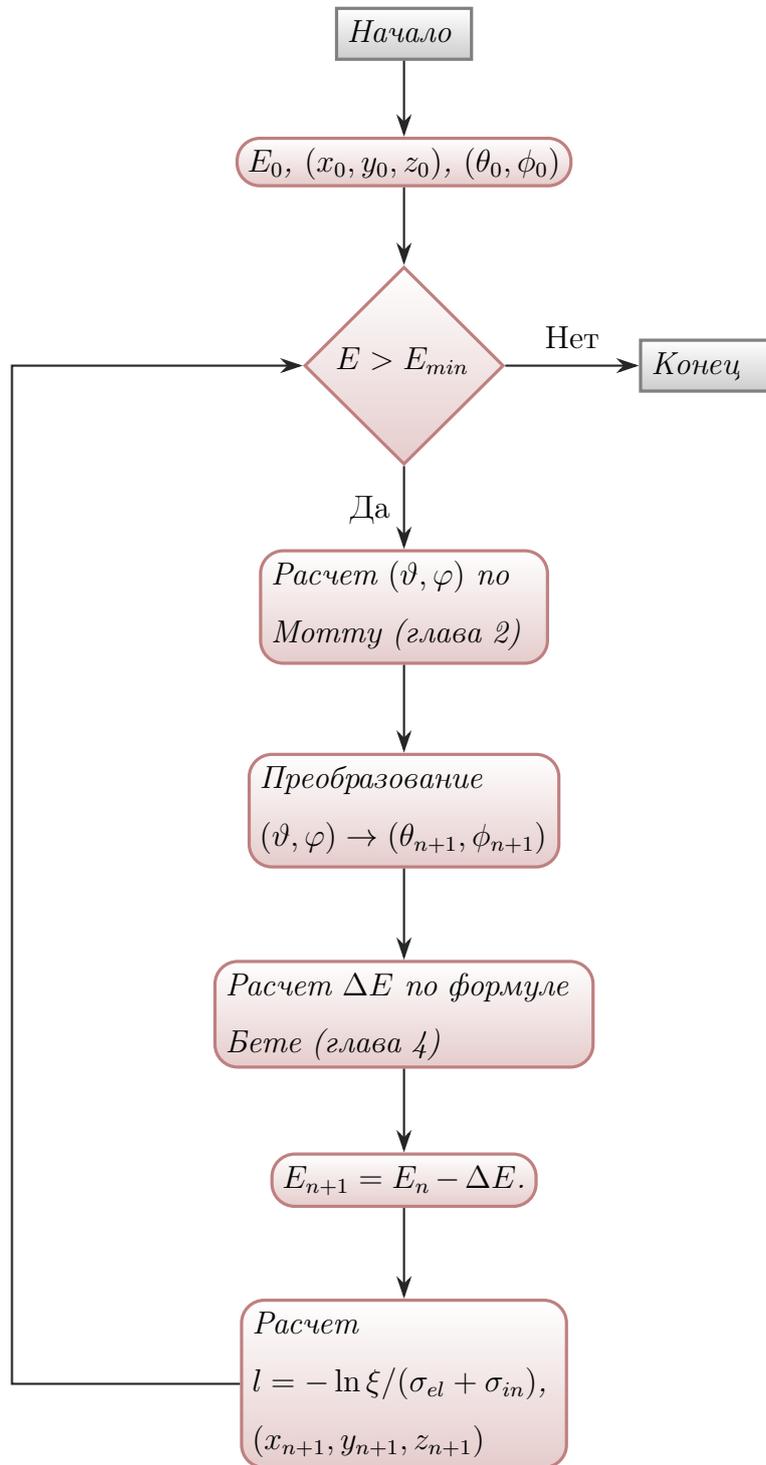


Рисунок 5 – Блок-схема для модели непрерывного замедления

# Глава 2 Моделирование упругих соударений электронов с атомами

## 2.1 Упругое рассеяние по теории Мотта

Дифференциальное сечение электронов при упругом рассеянии, вычислено Моттом на основе решения уравнения Дирака, дается выражением [25]

$$\frac{d\sigma_{el}^{Mott}}{d\Omega} = |f|^2 + |g|^2, \quad (2.1)$$

где амплитуды рассеяния  $f$  и  $g$  определяются формулами [26]

$$f = \frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{\infty} [(l+1)(e^{2i\eta_l} - 1) + l(e^{2i\eta_{l-1}} - 1)] P_l(\cos\vartheta), \quad (2.2)$$

$$g = \frac{1}{2ik} \sum_{l=1}^{\infty} (-e^{2i\eta_l} + e^{2i\eta_{l-1}}) P_l^1(\cos\vartheta). \quad (2.3)$$

Фазовый сдвиг рассеянных сферических волн  $\eta_l$  определяется выражением [27]

$$\tan(\eta_l) = \frac{kj_{l+1}(kr) - j_l(kr) \left[ (W+1) \tan(\phi_l) + \frac{l-l}{r} \right]}{kn_{l+1}(kr) - n_l(kr) \left[ (W+1) \tan(\phi_l) + \frac{l-l}{r} \right]}, \quad (2.4)$$

где  $W = 1 + K$  — полная энергия падающего электрона,  $K$  — его кинетическая энергия; значения  $\phi_l$  получаются численным интегрированием уравнения

$$\frac{d\phi_l}{dr} = W - V(r) - \cos(2\phi_l) - \frac{\ell+1}{r} \sin(2\phi_l), \quad (2.5)$$

причём  $V(r)$  — сферически-симметричная потенциальная энергия падающего электрона в кристаллической решетке.

Таким образом, задача сводится к вычислению кристаллического потенциала в окрестности атома, являющегося центром рассеяния. Потенциал кристаллической решетки определяется суперпозицией потенциалов атомов, расположенных в узлах, и зависит от симметрии решетки. Более подробные расчеты представлены в работе [5]. В нашей работе мы используем данные из

работы [5] в виде таблицы значений упругого дифференциальных сечений  $\frac{d\sigma_{el}^{Mott}}{d\Omega}$ , которые вычислены по формуле (2.1) и зависят от полярного угла рассеяния  $\vartheta$ .

Полное сечение упругого рассеяния определяется интегрированием

$$\sigma_{el}^{Mott} = 2\pi \int_0^\pi \frac{d\sigma_{el}^{Mott}}{d\Omega} \sin \vartheta d\vartheta. \quad (2.6)$$

## 2.2 Моделирование с использованием модифицированной по Мотту формулы Резерфорда–Бете

Для упругого рассеяния введем аналитическую формулу Резерфорда–Бете с экранированием поля ядра атомными электронами [28]:

$$\frac{\partial \sigma^{RB}}{\partial \Omega}(\vartheta, E) = r_e^2 Z(Z+1) \frac{1}{\beta^2 p^2} \frac{1}{(1+2\eta(E) - \cos \vartheta)^2}, \quad (2.7)$$

$$\beta^2 = \frac{v^2}{c^2} = \frac{T(T+2)}{(T+1)^2}, \quad p^2 = T(T+2),$$

где  $T = E/m_e c^2$  — кинетическая энергия электрона в единицах  $m_e c^2$ ,  $r_e = e^2/(m_e c^2)$  — классический радиус электрона,  $m_e$  — масса электрона,  $p$  — импульс электрона в единицах  $m_e c$ . Параметр экранирования  $\eta$  в первом приближении может быть вычислен по формуле

$$\eta_{RB} = \frac{1}{4} \left( \frac{\lambda}{r_a} \right)^2 = \frac{1}{4} \left( \frac{\lambda_C/p}{r_B 0.885 Z^{-1/3}} \right)^2 = \frac{1}{4} \left( \frac{\alpha}{0.885} \right)^2 \frac{Z^{2/3}}{p^2}, \quad (2.8)$$

где импульс электрона  $p$  измеряется в единицах  $m_e c$ ,  $\lambda = \lambda_C/p$  — приведённая длина волны электрона,  $\lambda_C = \hbar/(m_e c)$  — приведённая комптоновская длина волны электрона,  $r_a = r_B 0.885 Z^{-1/3}$  — радиус атома,  $r_B = \hbar^2/(e^2 m_e) = \lambda_C/\alpha$  — боровский радиус,  $\alpha = e^2/(\hbar c) \approx 1/137$  — постоянная тонкой структуры. Для быстрых частиц  $\eta \ll 1$ .

Интегрируя дифференциальное сечение (2.7) по всем углам, получаем пол-

ное сечение упругого рассеяния

$$\sigma_{el}^{RB}(E, \eta) = \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} \frac{\partial \sigma^{RB}}{\partial \Omega}(\cos \vartheta, E) \sin \vartheta d\vartheta d\varphi = \frac{A(E)}{2\eta(1+\eta)}, \quad (2.9)$$

где

$$A(E) = \frac{2\pi r_e^2 Z(Z+1)}{\beta^2 p^2}.$$

Вероятность однократного рассеяния в единичный телесный угол вблизи единичного вектора нового направления движения электрона  $\mathbf{\Omega}(\vartheta, \varphi)$

$$p_{RB}(\cos \vartheta, \eta) = \frac{1}{\sigma_{el}^{RB}(E, \eta)} \frac{\partial \sigma^{RB}}{\partial \Omega}(\cos \vartheta, E) = \frac{\eta(1+\eta)}{\pi(1+2\eta - \cos \vartheta)^2}. \quad (2.10)$$

Модифицируем формулу Резерфорда–Бете по табличным сечениям упругого рассеяния, вычисленным по Мотту так, чтобы полное сечение и первое транспортное сечение, вычисленные по модифицированной формуле, совпадали с полным сечением и первым транспортным сечением, вычисленными по Мотту. При этом имеем

$$p_{tr,1}^{Mott} = p_{tr,1}^{RB}(\eta_{MRB}), \quad (2.11)$$

или

$$\frac{\sigma_{tr,1}^{Mott}}{\sigma_{el}^{Mott}} = 2\pi \int_{-1}^1 p_{RB}(\cos \vartheta, \eta_{MRB})(1 - \cos \vartheta) d(\cos \vartheta). \quad (2.12)$$

Подставим (2.10) в (2.12) получим уравнение для неизвестной переменной  $\eta_{MRB}$ :

$$\frac{\sigma_{tr,1}^{Mott}}{\sigma_{el}^{Mott}} = 2\eta_{MRB}(1 + \eta_{MRB}) \ln \left( 1 + \frac{1}{\eta_{MRB}} \right) - 2\eta_{MRB}. \quad (2.13)$$

Численное решение этого уравнения  $\eta_{MRB}$  приведено в таблице 1.

Полное сечение по модифицированной формуле Резерфорда–Бете и полное сечение по оригинальной формуле Резерфорда–Бете, которую в дальнейшем будем называть формулой Резерфорда–Мотта, связаны соотношением

$$\sigma_{el}^{MRB}(E, \eta_{MRB}) = B(E) \sigma_{el}^{RB}(E, \eta_{MRB}), \quad (2.14)$$

где

$$\sigma_{el}^{MRB}(E, \eta_{MRB}) = \sigma_{el}^{Mott}(E).$$

Из уравнений (2.13) и (2.14) можно вычислить  $\eta_{MRB}(E)$  и  $B(E)$ . В результате вместо формулы (2.7) получим модифицированную формулу Резерфорда–Бете

$$\frac{\partial \sigma^{MRB}}{\partial \Omega}(\vartheta, E) = B(E) \left[ r_e^2 Z(Z+1) \frac{1}{\beta^2 p^2} \frac{1}{(1 + 2\eta_{MRB}(E) - \cos \vartheta)^2} \right], \quad (2.15)$$

вместо формулы (2.9) получим

$$\sigma_{el}^{MRB}(E, \eta_{MRB}) = B(E) \frac{A(E)}{2\eta_{MRB}(1 + \eta_{MRB})}, \quad (2.16)$$

и вместо формулы (2.10) получим вероятность однократного рассеяния в единичный телесный угол

$$\begin{aligned} p_{MRB}(\cos \vartheta, \eta_{MRB}) &= \frac{1}{\sigma_{el}^{MRB}(E, \eta_{MRB})} \frac{\partial \sigma^{MRB}}{\partial \Omega}(\cos \vartheta, E) \\ &= \frac{\eta_{MRB}(1 + \eta_{MRB})}{\pi(1 + 2\eta_{MRB} - \cos \vartheta)^2}. \end{aligned} \quad (2.17)$$

Полное сечение, первое и второе транспортные сечения, вычислены по формуле Резерфорда–Бете для Si, Cu, Ge, Au до и после модифицирования показаны на рисунках 6, 7 соответственно. Дифференциальные сечения рассеяния, вычисленные по формуле (2.15) показаны на рисунке 8.

Полярный угол упругого рассеяния при этом определяется решением интегрального уравнения

$$2\pi \int_0^{\vartheta(\xi)} p_{MRB}(\cos \vartheta, \eta_{MRB}) \sin \vartheta d\vartheta = \xi, \quad (2.18)$$

или

$$2\pi \int_0^{\vartheta(\xi)} \frac{\eta_{MRB}(1 + \eta_{MRB})}{\pi(1 + 2\eta_{MRB} - \cos \vartheta)^2} \sin \vartheta d\vartheta = \xi, \quad (2.19)$$

где  $\xi$  — случайное число от 0 до 1. Уравнение (2.19) имеет аналитическое решение:

$$\vartheta(\xi) = \arccos \left[ \frac{\xi(1 + 2\eta_{MRB}) - (1 + \eta_{MRB})}{\xi - (1 + \eta_{MRB})} \right]. \quad (2.20)$$

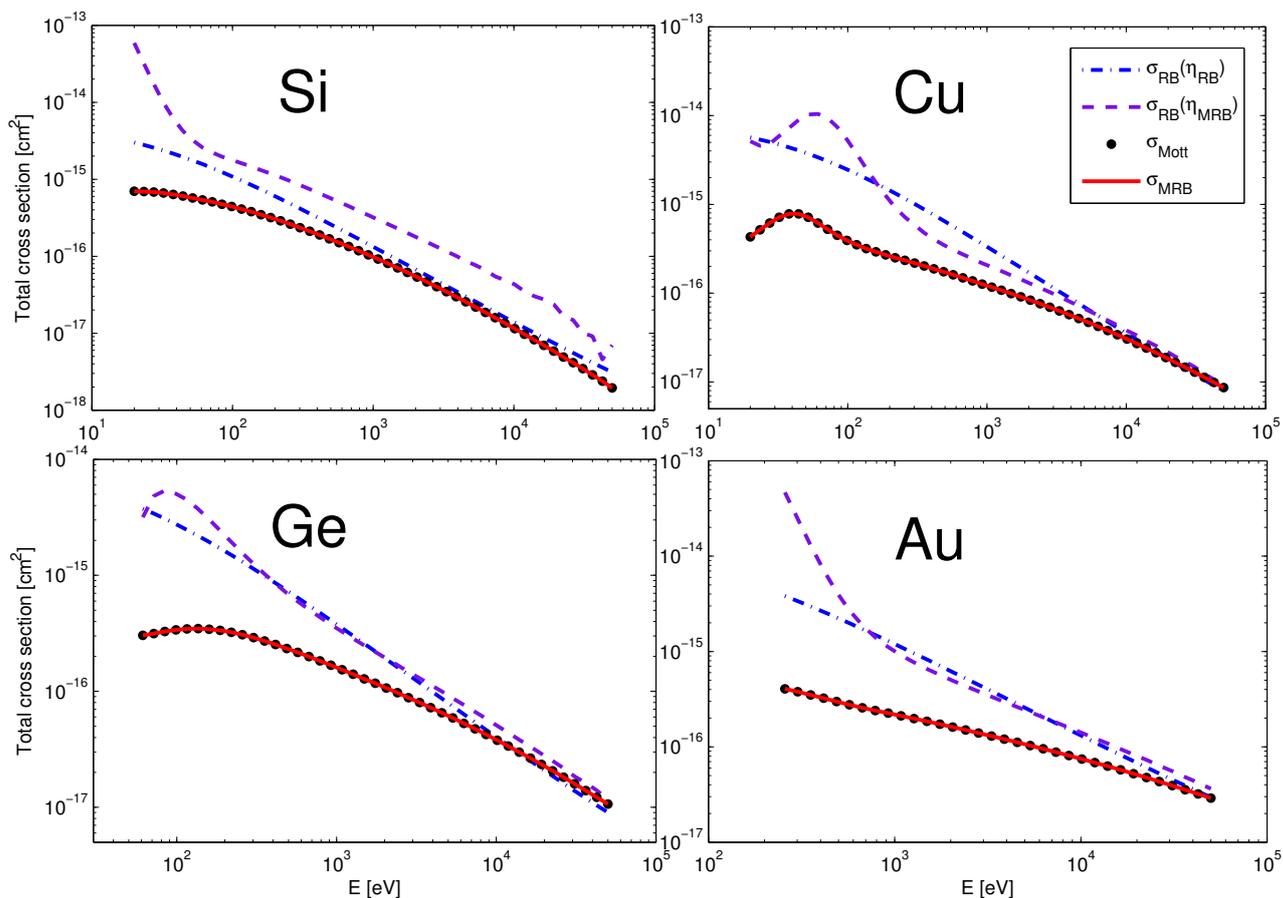


Рисунок 6 – Полное сечение Резерфорда–Бете до и после модифицирования для Si, Cu, Ge и Au

Таким образом, для моделирования упругого соударения, данные полного сечения  $\sigma_{el}^{MRB}(E) = \sigma_{el}^{Mott}(E)$  служат для нахождения вероятности упругого рассеяния, а данные параметра экранирования  $\eta_{MRB}(E)$  служат для расчета угла рассеяния при упругом рассеянии по формуле (2.20). Полученные полные сечения и параметры экранирования формулы Резерфорда–Бете, необходимые в компьютерном расчете в настоящей работе, применимые для Si, Cu, Ge и Au, включены в таблицу 1.

Таблица 1 – Параметр экранирования и полные сечения упругого рассеяния, рассчитанные по модифицированной формуле Резерфорда–Бете

Энергия (эВ)	Si		Cu		Ge		Au	
	$\sigma_{MRB}$ ( $\text{\AA}^2$ )	$\eta_{MRB}$						
20.000	6.9773	0.1285	4.3101	2.1778	–	–	13.087	0.6396

продолжение следует

(продолжение)

Энергия (эВ)	Si		Cu		Ge		Au	
	$\sigma_{MRB}$	$\eta_{MRB}$	$\sigma_{MRB}$	$\eta_{MRB}$	$\sigma_{MRB}$	$\eta_{MRB}$	$\sigma_{MRB}$	$\eta_{MRB}$
23.463	6.9319	0.1677	5.1779	1.9284	–	–	13.444	0.4151
27.525	6.8335	0.2159	6.1665	1.5395	–	–	13.061	0.2835
32.290	6.6262	0.2634	7.1631	1.1022	–	–	–	–
37.880	6.3592	0.2984	7.7997	0.7738	–	–	–	–
44.438	6.0566	0.3124	7.8168	0.5273	–	–	–	–
52.132	5.7166	0.3011	7.1585	0.3718	–	–	–	–
61.158	5.4029	0.2774	6.1723	0.2841	3.0341	0.8060	–	–
71.746	5.0809	0.2409	5.2444	0.2379	3.1445	0.4718	–	–
84.167	4.7462	0.2048	4.4967	0.2210	3.2793	0.3388	–	–
98.739	4.4320	0.1689	3.9340	0.2215	3.3814	0.2747	–	–
115.83	4.1080	0.1389	3.5085	0.2313	3.4553	0.2329	–	–
135.89	3.7908	0.1139	3.1784	0.2437	3.4689	0.2074	–	–
159.41	3.4666	0.0941	2.9226	0.2538	3.4325	0.1887	–	–
187.01	3.1734	0.0767	2.7047	0.2575	3.3495	0.1732	–	–
219.39	2.8853	0.0630	2.5098	0.2554	3.2262	0.1595	–	–
257.37	2.6087	0.0520	2.3410	0.2403	3.0751	0.1462	4.0539	0.0324
301.93	2.3523	0.0430	2.1850	0.2183	2.9022	0.1330	3.7820	0.0442
354.20	2.1098	0.0356	2.0249	0.1982	2.7180	0.1198	3.5063	0.0599
415.53	1.8909	0.0295	1.8795	0.1734	2.5309	0.1066	3.2343	0.0777
487.47	1.6882	0.0245	1.7407	0.1487	2.3380	0.0945	2.9810	0.0944
571.86	1.5028	0.0203	1.6113	0.1255	2.1630	0.0819	2.7616	0.1058
670.87	1.3351	0.0168	1.4894	0.1048	1.9903	0.0707	2.5715	0.1098
787.01	1.1816	0.0140	1.3758	0.0866	1.8285	0.0604	2.4055	0.1070
923.27	1.0437	0.0117	1.2663	0.0716	1.6772	0.0513	2.2555	0.0991
1083.1	0.91879	0.0097	1.1702	0.0583	1.5358	0.0433	2.1151	0.0887
1270.6	0.80761	0.0081	1.0778	0.0475	1.4057	0.0363	1.9822	0.0774
1490.6	0.70671	0.0067	0.99055	0.0388	1.2815	0.0305	1.8535	0.0665
1748.7	0.61694	0.0056	0.9096	0.0316	1.1724	0.0253	1.7309	0.0565
2051.4	0.53642	0.0047	0.83289	0.0258	1.0679	0.0210	1.6129	0.0476
2406.6	0.46547	0.0039	0.76158	0.0210	0.97181	0.0175	1.5017	0.0398

продолжение следует

(продолжение)

Энергия (эВ)	Si		Cu		Ge		Au	
	$\sigma_{MRB}$	$\eta_{MRB}$	$\sigma_{MRB}$	$\eta_{MRB}$	$\sigma_{MRB}$	$\eta_{MRB}$	$\sigma_{MRB}$	$\eta_{MRB}$
2823.2	0.40222	0.0032	0.69458	0.0172	0.88102	0.0146	1.3963	0.0331
3312.0	0.34619	0.0027	0.63227	0.0141	0.80011	0.0121	1.2975	0.0275
3885.4	0.29805	0.0023	0.57363	0.0116	0.72338	0.0100	1.2037	0.0227
4558.1	0.25541	0.0019	0.51953	0.0095	0.65336	0.0083	1.1161	0.0188
5347.2	0.21856	0.0016	0.46949	0.0078	0.58856	0.0070	1.0331	0.0155
6273.0	0.18653	0.0013	0.42308	0.0064	0.52892	0.0058	0.95453	0.0128
7359.0	0.15876	0.0012	0.37951	0.0054	0.47436	0.0048	0.88106	0.0106
8633.1	0.13487	0.0010	0.34050	0.0044	0.42430	0.0040	0.81139	0.0088
10128	0.11463	0.0008	0.30431	0.0037	0.37867	0.0034	0.74592	0.0073
11881	0.09689	0.0007	0.27106	0.0031	0.33704	0.0028	0.68397	0.0060
13938	0.08220	0.0006	0.24100	0.0026	0.29908	0.0024	0.62694	0.0050
16351	0.06947	0.0005	0.21353	0.0021	0.26517	0.0020	0.57314	0.0042
19182	0.05857	0.0004	0.18877	0.0018	0.23431	0.0017	0.52252	0.0035
22503	0.04909	0.0004	0.16636	0.0015	0.20662	0.0014	0.47625	0.0029
26399	0.04130	0.0003	0.14652	0.0013	0.18151	0.0012	0.43257	0.0024
30969	0.03471	0.0004	0.12877	0.0011	0.15957	0.0010	0.39260	0.0020
36331	0.02874	0.0003	0.11288	0.0009	0.13964	0.0009	0.35539	0.0017
42621	0.02382	0.0004	0.09885	0.0008	0.12206	0.0007	0.32095	0.0015
50000	0.01945	0.0002	0.08664	0.0007	0.10650	0.0007	0.28953	0.0012

## Выводы по главе

Путем изменения параметра экранирования, классическая формула Резерфорда – Бете подгоняется так, чтобы полное сечение и первое транспортное сечение совпали с такими же сечениями, полученными по релятивистской формуле Мотта. Это позволяет создать простой алгоритм для нахождения угла рассеяния электронов на атоме для построения траекторий электронов.

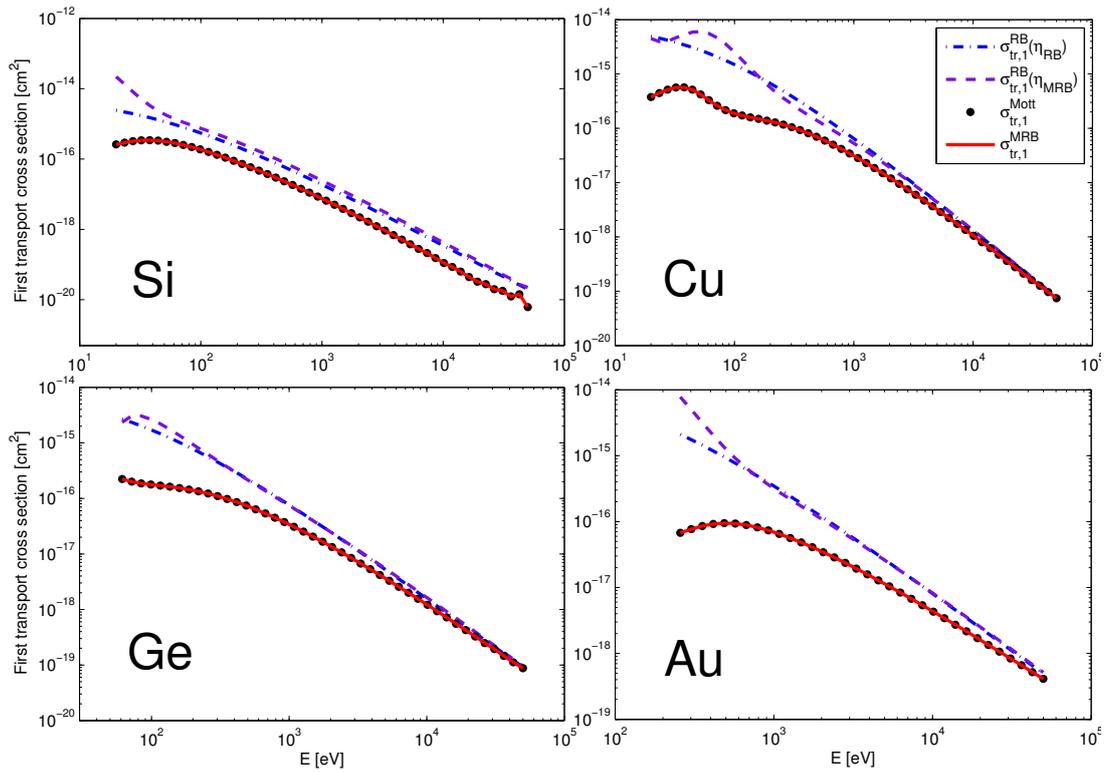


Рисунок 7 – Первое транспортное сечение по Резерфорду–Бете до и после модифицирования для Si, Cu, Ge и Au

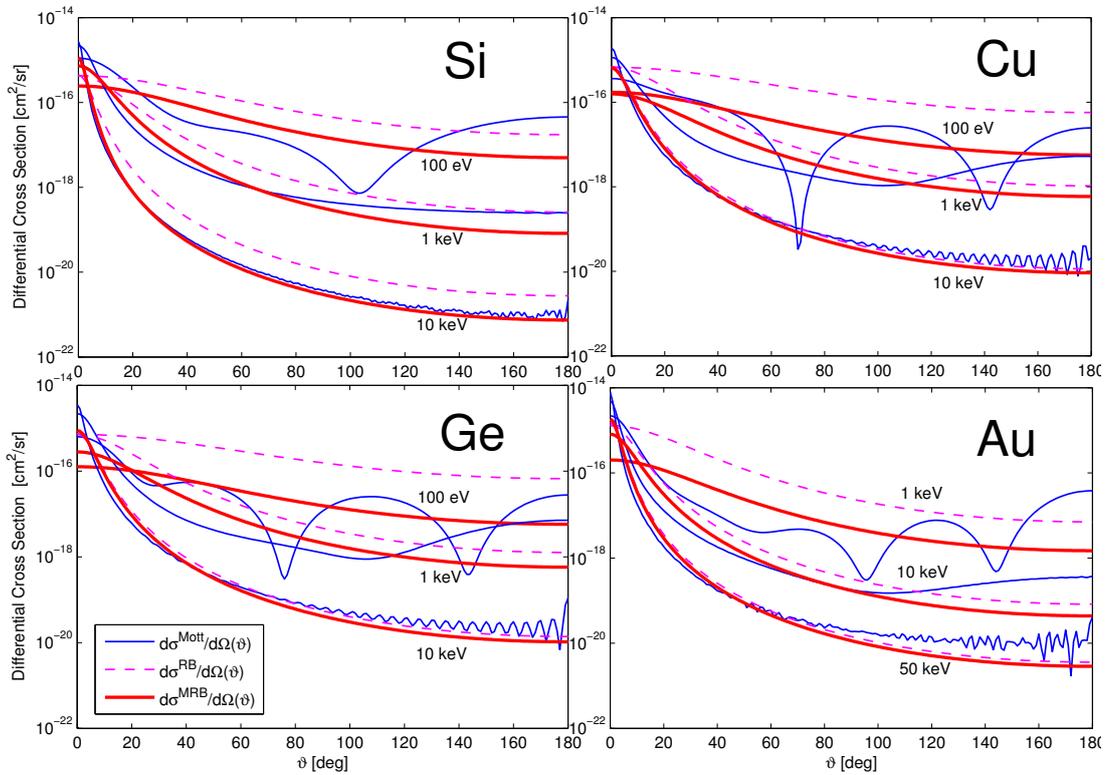


Рисунок 8 – Дифференциальные сечения по Резерфорду–Бете до и после модифицирования для Si, Cu, Ge и Au при различных энергиях

# Глава 3 Моделирование неупругих соударений электронов с атомами по теории Гризинского

## 3.1 Формула Гризинского

Основным процессом при неупругом рассеянии электрона является однократная ионизация атомов вещества. При этом электрон теряет свою энергию дискретным образом. Для сечения ионизации атома при взаимодействии с налетающим электроном было предложено несколько выражений. Наиболее широкое применение получила полуклассическая нерелятивистская формула Гризинского для дифференциального сечения однократной ионизации атома электроном с энергией  $E$ , которая сопровождается потерей энергии  $\Delta E$ , то есть вероятности того, что при единичной плотности потока (за 1 секунду единичную площадку пересекает один электрон) этот электрон столкнется с одним атомом, расположенным в некоторой точке этой площадки, и при этом произойдет однократная ионизация атома, т.е. будет выбит один из  $n_i$  электронов, находящихся на  $i$ -той оболочке атома с энергией связи  $U_i$  и ему будет сообщена некоторая кинетическая энергия, так что потеря энергии столкнувшегося с атомом электрона составит величину  $\Delta E > U_i$ :

$$\frac{\partial \sigma(E, \Delta E)}{\partial \Delta E} = \sum_i n_i \frac{\partial \sigma_i(E, U_i, \Delta E)}{\partial \Delta E}. \quad (3.1)$$

Здесь суммирование ведётся по всем оболочкам атома,  $\partial \sigma_i / \partial \Delta E$  – дифференциальное сечение однократной ионизации  $i$ -той оболочки атома. Предложенная Гризинским формула для вычисления этого дифференциального сечения имеет вид [8]

$$\frac{\partial \sigma_i(E, U_i, \Delta E)}{\partial \Delta E} = \frac{\pi e^4 U_i}{\Delta E^3 E} \left( \frac{E}{E + U_i} \right)^{\frac{3}{2}} \left( 1 - \frac{\Delta E}{E} \right)^{\frac{U_i}{U_i + \Delta E}} \times$$

$$\times \left\{ \frac{\Delta E}{U_i} \left( 1 - \frac{U_i}{E} \right) + \frac{4}{3} \ln \left( 2.7 + \left( \frac{E - \Delta E}{U_i} \right)^{\frac{1}{2}} \right) \right\}. \quad (3.2)$$

Эта формула широко используется по причине её хорошего совпадения с экспериментально измеренными сечениями процессов однократной ионизации атомов. Однако эта формула не точна при рассмотрении неупругого рассеяния на валентных электронах твёрдого тела поскольку валентные электроны в твёрдом теле находятся в иных энергетических состояниях, чем в уединённом атоме.

Для использования формулы надо знать экспериментальные значения энергий связи электронов в уединённых атомах. В таблице 2, приведённой в работе [23], даны значения энергий связи электронов в атомах элементарных веществ с атомными номерами от 1 до 82.

Таблица 2 – Число электронов в каждой оболочке атомов и энергии ионизации оболочек

Оболочка	$n_i$	$U_i$ (эВ)										
	1-H		2-He		3-Li		4-Be		5-B		6-C	
1s	1	13.5985	2	24.5876	2	64.4	2	123.6	2	201	2	296
2s					1	5.3918	2	9.3227	2	12.93	2	16.59
2p <sup>1/2</sup>									1	8.2981	2	11.26
	7-N		8-O		9-F		10-Ne		11-Na		12-Mg	
1s	2	403	2	538	2	694	2	870.27	2	1079	2	1311.3
2s	2	20.33	2	28.48	2	37.86	2	47.47	2	70.9	2	96.5
2p <sup>1/2</sup>	3	4.5341	3	13.618	3	17.423	3	21.565	3	38.46	3	57.6
2p <sup>3/2</sup>			1	13.618	2	17.423	3	21.565	3	38	3	57.6
3s									1	5.1391	2	7.6463
	13-Al		14-Si		15-P		16-S		17-Cl		18-Ar	
1s	2	1567	2	1844	2	2148	2	2476	2	2829	2	3206
2s	2	126	2	154	2	191	2	232	2	277	2	326.37

продолжение следует

(продолжение)

$2p^{1/2}$	3	81	3	104	3	135	3	170	3	208	3	250.6
$2p^{3/2}$	3	80	3	104	3	134	3	168	3	206	3	248.6
$3s$	2	10.62	2	13,46	2	16,15	2	20.2	2	24,59	2	29.24
$3p^{1/2}$	1	5.9858	2	8.1517	3	10.4868	3	10.36	3	12,968	3	15.76
$3p^{3/2}$							1	10.36	2	12.968	3	15.76
	19-K		20-Ca		21-Sc		22-Ti		23-V		24-Cr	
$1s$	2	3614	2	4048	2	4494	2	4970	2	5470	2	5995
$2s$	2	384	2	447	2	503	2	567	2	633	2	702
$2p^{1/2}$	3	303.3	3	360	3	408	3	465	3	525	3	589
$2p^{3/2}$	3	300.7	3	356	3	404	3	459	3	518	3	580
$3s$	2	37	2	48	2	56	2	64	2	72	2	80
$3p^{1/2}$	3	24.82	3	34.7	3	33	3	39	3	44	3	49
$3p^{3/2}$	3	24.49	3	34.3	3	33	3	38	3	43	3	48
$3d^{3/2}$	–	–	–	–	1	9.353	2	11.99	3	13.87	4	10.17
$4s$	1	4.3407	2	6.1132	2	6.5615	2	6.82	2	6.74	2	6.766
	25-Mn		26-Fe		27-Co		28-Ni		29-Cu		30-Zn	
$1s$	2	6544	2	7117	2	7715	2	8338	2	8986	2	9663
$2s$	2	755	2	851	2	931	2	1015	2	1103	2	1198
$2p^{1/2}$	3	656	3	726	3	800	3	877	3	958	3	1052
$2p^{3/2}$	3	652	3	713	3	785	3	860	3	958	3	1029
$3s$	2	89	2	98	2	107	2	117	2	127	2	141
$3p^{1/2}$	3	55	3	61	3	68	3	75	3	82	3	98.7
$3p^{3/2}$	3	53	3	59	3	66	3	73	3	80	3	96.1
$3d^{3/2}$	5	17.38	5	17.6	5	18.38	5	19.24	5	13.37	5	21.29
$3d^{5/2}$	–	–	1	17.6	2	18.38	3	19.24	4	13.37	5	21.29
$4s$	2	7.434	2	7.9024	2	7.86	2	7.637	2	7.7264	2	9.3943
	31-Ga		32-Ge		33-As		34-Se		35-Br		36-Kr	
$1s$	2	10371	2	11107	2	11871	2	12662	2	13481	2	14327
$2s$	2	1302	2	1413	2	1531	2	1656	2	1787	2	1923
$2p^{1/2}$	3	1146	3	1251	3	1362	3	1479	3	1602	3	1731
$2p^{3/2}$	3	1119	3	1220	3	1327	3	1439	3	1556	3	1678

продолжение следует

(продолжение)

3s	2	162	2	184	2	208	2	234	2	262	2	293
3p <sup>1/2</sup>	3	111	3	130	3	151	3	173	3	197	3	222
3p <sup>3/2</sup>	3	107	3	125	3	145	3	166	3	189	3	214.6
3d <sup>3/2</sup>	5	21	5	33	5	46	5	61	5	77	5	95
3d <sup>5/2</sup>	5	20	5	32	5	45	5	60	5	76	5	93.8
4s	2	11.87	2	14.28	2	18.96	2	22.19	2	23.8	2	27.51
4p <sup>1/2</sup>	1	5.9993	2	7.8995	3	9.789	3	9.752	3	11.814	3	13.9997
4p <sup>3/2</sup>							1	9.752	2	11.814	3	13.9997
	37-Rb		38-Sr		39-Y		40-Zr		41-Nb		42-Mo	
1s	2	15203	2	16108	2	17041	2	18002	2	18990	2	20006
2s	2	2068	2	2219	2	2375	2	2536	2	2702	2	2872
2p <sup>1/2</sup>	3	1867	3	2010	3	2158	3	2311	3	2469	3	2632
2p <sup>3/2</sup>	3	1807	3	1943	3	2083	3	2227	3	2375	3	2527
3s	2	325	2	361	2	397	2	434	2	472	2	511
3p <sup>1/2</sup>	3	254.3	3	288	3	315	3	348	3	432	3	416
3p <sup>3/2</sup>	3	245.4	3	278	3	304	3	335	3	367	3	399
3d <sup>3/2</sup>	5	117.4	5	144	5	163	5	187	5	212	5	237
3d <sup>5/2</sup>	5	116	5	142	5	161	5	185	5	209	5	234
4s	2	114	2	40	2	48	2	56	2	62	2	68
4p <sup>1/2</sup>	3	21.77	3	29.2	3	30	3	35	3	40	3	45
4p <sup>3/2</sup>	3	20.71	3	28.2	3	29	3	33	3	38	3	42
4d <sup>3/2</sup>	–	–	–	–	1	6.799	2	9.164	4	8.181	5	9.739
5s	1	4.1772	2	6.217	2	6.217	2	6.634	2	6.759	1	7.0924
	43-Tc		44-Ru		45-Rh		46-Pd		47-Ag		48-Cd	
1s	2	21050	2	22123	2	23225	2	24357	2	25520	2	26715
2s	2	3048	2	3230	2	3418	2	3611	2	3812	2	4022
2p <sup>1/2</sup>	3	2800	3	2973	3	3152	3	3337	3	3530	3	3732
2p <sup>3/2</sup>	3	2683	3	2844	3	3010	3	3180	3	3357	3	3542
3s	2	551	2	592	2	634	2	677	2	724	2	775
3p <sup>1/2</sup>	3	451	3	488	3	526	3	565	3	608	3	659
3p <sup>3/2</sup>	3	432	3	466	3	501	3	537	3	577	3	625

продолжение следует

(продолжение)

$3d^{3/2}$	5	263	5	290	5	318	5	347	5	379	5	419
$3d^{5/2}$	5	259	5	286	5	313	5	342	5	376	5	412
$4s$	2	74	2	81	2	87	2	93	2	101	2	112
$4p^{1/2}$	3	49	3	53	3	58	3	63	3	69	3	78
$4p^{3/2}$	3	45	3	49	3	53	3	57	3	63	3	71
$4d^{3/2}$	5	14.8	5	11.23	5	12.25	5	8.33	5	14.62	5	18.28
$4d^{5/2}$	–	–	2	11.23	3	12.25	5	8.33	5	14.62	5	17.58
$5s$	2	7.28	1	7.366	1	7.46			1	7.5763	2	8.9939
	49-In		50-Sn		51-Sb		52-Te		53-I		54-Xe	
$1s$	2	27944	2	29204	2	30496	2	31820	2	33176	2	34561
$2s$	2	4242	2	4469	2	4703	2	4945	2	5195	2	5453
$2p^{1/2}$	3	3943	3	4160	3	4385	3	4618	3	4858	3	5107
$2p^{3/2}$	3	3735	3	3933	3	4137	3	4347	3	4563	3	4787
$3s$	2	830	2	888	2	949	2	1012	2	1078	2	1149
$3p^{1/2}$	3	707	3	761	3	817	3	876	3	987	3	1002
$3p^{3/2}$	3	669	3	719	3	771	3	825	3	881	3	941
$3d^{3/2}$	5	455	5	497	5	542	5	589	5	638	5	689
$3d^{5/2}$	5	447	5	489	5	533	5	578	5	626	5	677
$4s$	2	126	2	141	2	157	2	174	2	193	2	213.3
$4p^{1/2}$	3	90	3	102	3	114	3	127	3	141	3	157
$4p^{3/2}$	3	82	3	93	3	104	3	117	3	131	3	145.5
$4d^{3/2}$	5	21	5	29	5	38	5	48	5	58	5	69.5
$4d^{5/2}$	5	20	5	28	5	37	5	46	5	56	5	67.5
$5s$	2	11.03	2	13.1	2	16.86	2	17.84	2	20.61	2	23.4
$5p^{1/2}$	1	5.7864	2	7.344	3	8.6084	3	9.01	3	10.45	3	12.1299
$5p^{3/2}$							1	9.01	2	10.45	3	12.1299
	55-Cs		56-Ba		57-La		58-Ce		59-Pr		60-Nd	
$1s$	2	35987	2	37442	2	38928	2	40446	2	41995	2	43575
$2s$	2	5717	2	5991	2	6269	2	6552	2	6839	2	7132
$2p^{1/2}$	3	5362	3	5626	3	5894	3	6167	3	6444	3	6727
$2p^{3/2}$	3	5014	3	5249	3	5486	3	5726	3	5968	3	6213

продолжение следует

(продолжение)

3s	2	1220	2	1293	2	1365	2	1437	2	1509	2	1580
3p <sup>1/2</sup>	3	1068	3	1138	3	1207	3	1275	3	1342	3	1408
3p <sup>3/2</sup>	3	1005	3	1063	3	1124	3	1184	3	1244	3	1303
3d <sup>3/2</sup>	5	746	5	797	5	851	5	903	5	954	5	1005
3d <sup>5/2</sup>	5	732	5	788	5	834	5	885	5	934	5	983
4s	2	233	2	254	2	273	2	291	2	307	2	321
4p <sup>1/2</sup>	3	174	3	193	3	210	3	225	3	238	3	250
4p <sup>3/2</sup>	3	164	3	181	3	196	3	209	3	220	3	230
4d <sup>3/2</sup>	5	81	5	101	5	105	5	114	5	121	5	126
4d <sup>5/2</sup>	5	79	5	98.4	5	103	5	111	5	117	5	122
4f <sup>5/2</sup>	–	–	–	–	–	–	2	12.79	3	14.82	4	16.05
5s	2	25	2	31	2	36	2	39	2	41	2	42
5p <sup>1/2</sup>	3	19.07	3	24.8	3	22	3	25	3	27	3	28
5p <sup>3/2</sup>	3	17.21	3	22.8	3	19	3	22	3	24	3	25
5d <sup>3/2</sup>	–	–	–	–	1	7.316	–	–	–	–	–	–
6s	1	3.8939	2	5.2117	2	5.577	2	5.539	2	5.47	2	5.525
		61-Pm		62-Sm		63-Eu		64-Gd		65-Tb		66-Dy
1s	2	45188	2	46837	2	48522	2	50243	2	51999	2	53792
2s	2	7432	2	7740	2	8056	2	8380	2	8711	2	9050
2p <sup>1/2</sup>	3	7017	3	7315	3	7621	3	7935	3	8256	3	8585
2p <sup>3/2</sup>	3	6464	3	6720	3	6981	3	7247	3	7518	3	7794
3s	2	1653	2	1728	2	1805	2	1884	2	1965	2	2048
3p <sup>1/2</sup>	3	1476	3	1546	3	1618	3	1692	3	1768	3	1846
3p <sup>3/2</sup>	3	1362	3	1422	3	1484	3	1547	3	1612	3	1678
3d <sup>3/2</sup>	5	1057	5	1110	5	1164	5	1220	5	1277	5	1335
3d <sup>5/2</sup>	5	1032	5	1083	5	1135	5	1189	5	1243	5	1298
4s	2	335	2	349	2	364	2	380	2	398	2	416
4p <sup>1/2</sup>	3	261	3	273	3	286	3	300	3	315	3	331
4p <sup>3/2</sup>	3	240	3	251	3	262	3	273	3	285	3	297
4d <sup>3/2</sup>	5	131	5	137	5	143	5	150	5	157	5	164
4d <sup>5/2</sup>	5	127	5	132	5	137	5	143	5	150	5	157
4f <sup>5/2</sup>	5	16.9	6	17.9	7	19.11	7	28.19	7	27.66	7	18.7

продолжение следует

(продолжение)

$4f^{7/2}$	–	–	–	–	–	–	–	–	1	27.66	3	18.7
$5s$	2	43	2	44	2	45	2	46	2	48	2	50
$5p^{1/2}$	3	28	3	29	3	30	3	31	3	32	3	33
$5p^{3/2}$	3	25	3	25	3	26	3	27	3	28	3	28
$5d^{3/2}$	–	–	–	–	–	–	1	7.751	1	7.292	–	–
$6s$	2	5.58	2	5.644	2	5.6704	2	6.15	2	5.864	2	5.939
	67-Ho		68-Er		69-Tm		70-Yb		71-Lu		72-Hf	
$1s$	2	55622	2	57489	2	59393	2	61335	2	63320	2	65350
$2s$	2	9398	2	9754	2	10118	2	10490	2	10876	2	11275
$2p^{1/2}$	3	8922	3	9267	3	9620	3	9981	3	10355	3	10742
$2p^{3/2}$	3	8075	3	8361	3	8651	3	8946	3	9250	3	9564
$3s$	2	2133	2	2220	2	2309	2	2401	2	2499	2	2604
$3p^{1/2}$	3	1926	3	2208	3	2092	3	2178	3	2270	3	2369
$3p^{3/2}$	3	1746	3	1815	3	1885	3	1956	3	2032	3	2113
$3d^{3/2}$	5	1395	5	1456	5	1518	5	1580	5	1647	5	1720
$3d^{5/2}$	5	1354	5	1412	5	1471	5	1531	5	1596	5	1665
$4s$	2	434	2	452	2	471	2	490	2	514	2	542
$4p^{1/2}$	3	348	3	365	3	382	3	399	3	420	3	444
$4p^{3/2}$	3	310	3	323	3	336	3	349	3	366	3	386
$4d^{3/2}$	5	172	5	181	5	190	5	200	5	213	5	229
$4d^{5/2}$	5	164	5	172	5	181	5	190	5	202	5	217
$4f^{5/2}$	7	18.87	7	18.86	7	18.96	7	19.26	7	(?)	7	38.545
$4f^{7/2}$	4	18.87	5	18.86	6	18.96	7	19.26	7	(?)	7	38.545
$5s$	2	52	2	54	2	56	2	58	2	62	2	68
$5p^{1/2}$	3	34	3	35	3	36	3	37	3	39	3	43
$5p^{3/2}$	3	29	3	30	3	30	3	31	3	32	3	35
$5d^{3/2}$	–	–	–	–	–	–	–	–	1	(?)	2	8.73
$6s$	2	6.022	2	6.108	2	6.184	2	6.254	2	5.426	2	6.8
	73-Ta		74-W		75-Re		76-Os		77-Ir		78-Pt	
$1s$	2	67419	2	69529	2	71681	2	73876	2	76115	2	78399
$2s$	2	11684	2	12103	2	12532	2	12972	2	13422	2	13883

продолжение следует

(продолжение)

$2p^{1/2}$	3	11139	3	11546	3	11963	3	12390	3	12828	3	13277
$2p^{3/2}$	3	9884	3	10209	3	10540	3	10876	3	11219	3	11567
$3s$	2	2712	2	2823	2	2937	2	3054	2	3175	2	3300
$3p^{1/2}$	3	2472	3	2577	3	2686	3	2797	3	2912	3	3030
$3p^{3/2}$	3	2197	3	2283	3	2371	3	2461	3	2554	3	2649
$3d^{3/2}$	5	1796	5	1874	5	1953	5	2035	5	2119	5	2206
$3d^{5/2}$	5	1737	5	1811	5	1887	5	1964	5	2044	5	2126
$4s$	2	570	2	599	2	629	2	660	2	693	2	727
$4p^{1/2}$	3	469	3	495	3	522	3	551	3	581	3	612
$4p^{3/2}$	3	407	3	428	3	450	3	473	3	497	3	522
$4d^{3/2}$	5	245	5	261	5	278	5	295	5	314	5	335
$4d^{5/2}$	5	232	5	248	5	264	5	280	5	298	5	318
$4f^{5/2}$	7	48.822	7	59.611	7	70.837	7	83.064	7	95.683	7	104.41
$4f^{7/2}$	7	48.822	7	59.611	7	70.837	7	83.064	7	95.683	7	104.41
$5s$	2	74	2	80	2	86	2	92	2	99	2	106
$5p^{1/2}$	3	47	3	51	3	56	3	61	3	66	3	71
$5p^{3/2}$	3	38	3	41	3	45	3	49	3	53	3	57
$5d^{3/2}$	3	10.48	4	12.08	5	13.94	5	14.53	5	15.58	5	12.89
$5d^{5/2}$	–	–	–	–	–	–	1	14.53	2	15.58	4	12.89
$6s$	2	7.89	2	7.98	2	7.88	2	8.73	2	9.05	1	8.96
	79-Au		80-Hg		81-Tl		82-Pb					
$1s$	2	80729	2	83108	2	85536	2	88011				
$2s$	2	14356	2	14845	2	15350	2	15867				
$2p^{1/2}$	3	13738	3	14214	3	14704	3	15206				
$2p^{3/2}$	3	11923	3	12288	3	12662	3	13041				
$3s$	2	3430	2	3567	2	3710	2	3857				
$3p^{1/2}$	3	3153	3	3283	3	3420	3	3560				
$3p^{3/2}$	3	2748	3	2852	3	2961	3	3072				
$3d^{3/2}$	5	2295	5	2390	5	2490	5	2592				
$3d^{5/2}$	5	2210	5	2300	5	2394	5	2490				
$4s$	2	764	2	809	2	852	2	899				
$4p^{1/2}$	3	645	3	686	3	726	3	769				

продолжение следует

(продолжение)

$4p^{3/2}$	3	548	3	584	3	615	3	651				
$4d^{3/2}$	5	357	5	385	5	411	5	441				
$4d^{5/2}$	5	339	5	366	5	391	5	419				
$4f^{5/2}$	7	117.65	7	134.16	7	157.32	7	179.02				
$4f^{7/2}$	7	117.65	7	134.16	7	157.32	7	179.02				
$5s$	2	114	2	134	2	139	2	153				
$5p^{1/2}$	3	76	3	90	3	98	3	111				
$5p^{3/2}$	3	61	3	72	3	79	3	90				
$5d^{3/2}$	5	14.14	5	19.05	5	26.32	5	33.18				
$5d^{5/2}$	5	14.14	5	19.05	5	26.32	5	33.18				
$6s$	1	9.2256	2	10.4376	2	9.8196	2	12.409				
$6p^{1/2}$					1	6.1083	2	7.4167				

Дифференциальные обратные длины неупругого рассеяния связаны с дифференциальными сечениями однократной ионизации выражением

$$\frac{\partial \lambda^{-1}}{\partial \Delta E} = \sum_i n_i \frac{\partial \sigma_i(E, U_i, \Delta E)}{\partial \Delta E}, \quad (3.3)$$

где  $n_i$  – число электронов в  $i$ -й оболочке атома. Дифференциальные обратные длины неупругого рассеяния для Si, Cu и Au, вычисленные по формулам (3.1) и (3.2) и по оптическим данным, показаны на рисунках 9, 10 и 11 соответственно. Из этих рисунков видно, что при энергиях электронов, близких к энергиям ионизации оболочек, имеют место скачки дифференциальной обратной длины неупругого рассеяния вследствие резонансного возбуждения оболочек налетающим электроном.

Интегрированием дифференциальных сечений, даваемых формулой Гринского, по потерянной электроном энергии получим сечение однократной ионизации  $i$ -ой оболочки атома:

$$\sigma_i(E, U_i) = n_i \int_{\Delta E_{\min}}^{\Delta E_{\max}} \frac{\partial \sigma_i(E, U_i, \Delta E)}{\partial \Delta E} d(\Delta E), \quad (3.4)$$

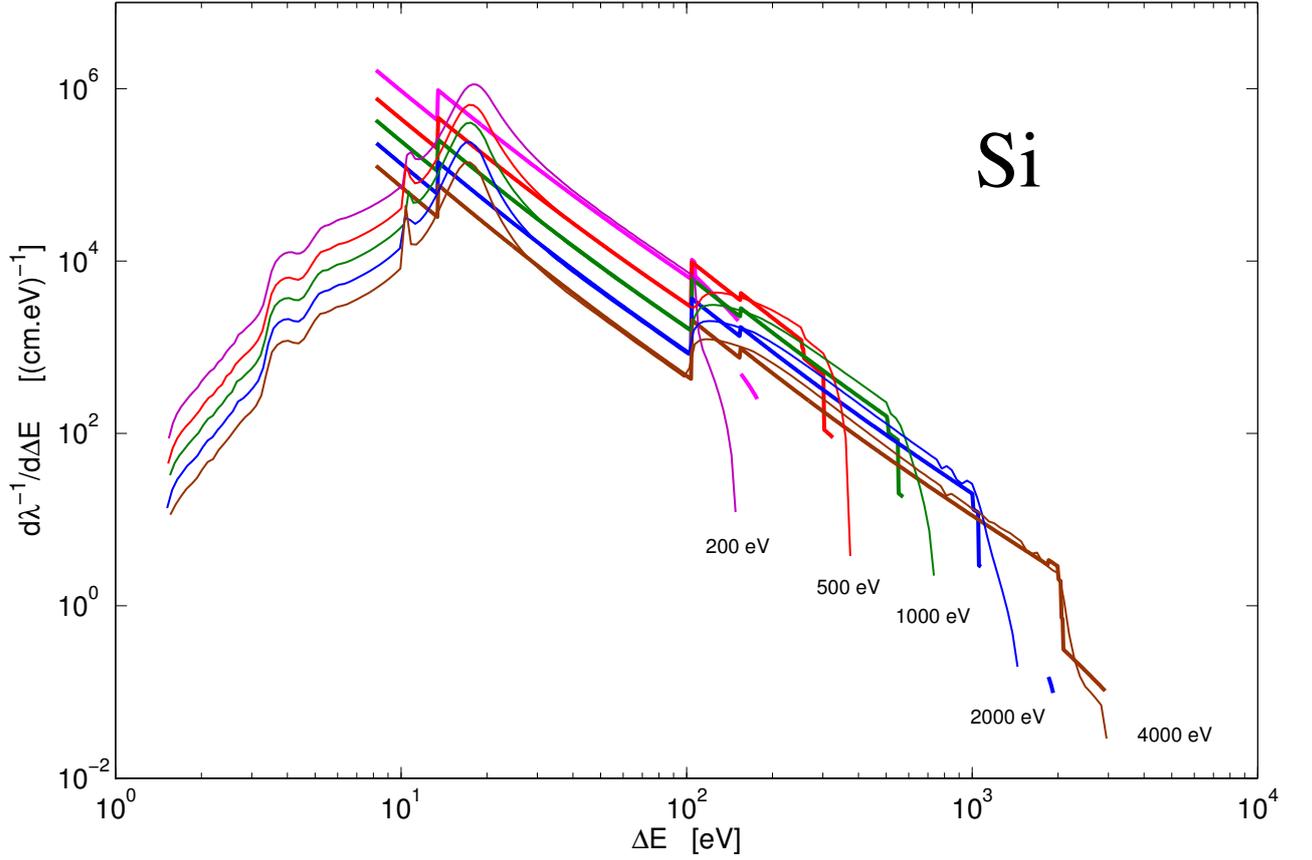


Рисунок 9 – Зависимости дифференциальные обратных длины от энергии потери для различных значений энергии налетающих электронов, вычисленные для кремния: жирные линии – по теории Гризинского (3.1), тонкие линии – по оптическим данным (3.11)

где  $\Delta E_{\min}$  и  $\Delta E_{\max}$  - минимальная и максимальная энергии потерь подающего электрона, причём  $\Delta E_{\min} = U_i$ , а  $\Delta E_{\max} = (E + U_i)/2$  в силу неразличимости электронов падающего на атом и выбитого из него в результате ионизации. Полное сечение рассеяния равно сумме сечений по всем отдельным актам с ионизацией:

$$\sigma(E) = \sum_i \sigma_i(E, U_i). \quad (3.5)$$

Результаты расчётов сечения рассеяния для кремния на каждой оболочке по формуле (3.4) для Al, Si, Cu и Au показаны на рисунке 12. Результаты расчётов полного сечения для Al, Si, Cu и Au показаны на рисунке 13.

Воспользовавшись выражением для полного сечения (3.5), получим сред-

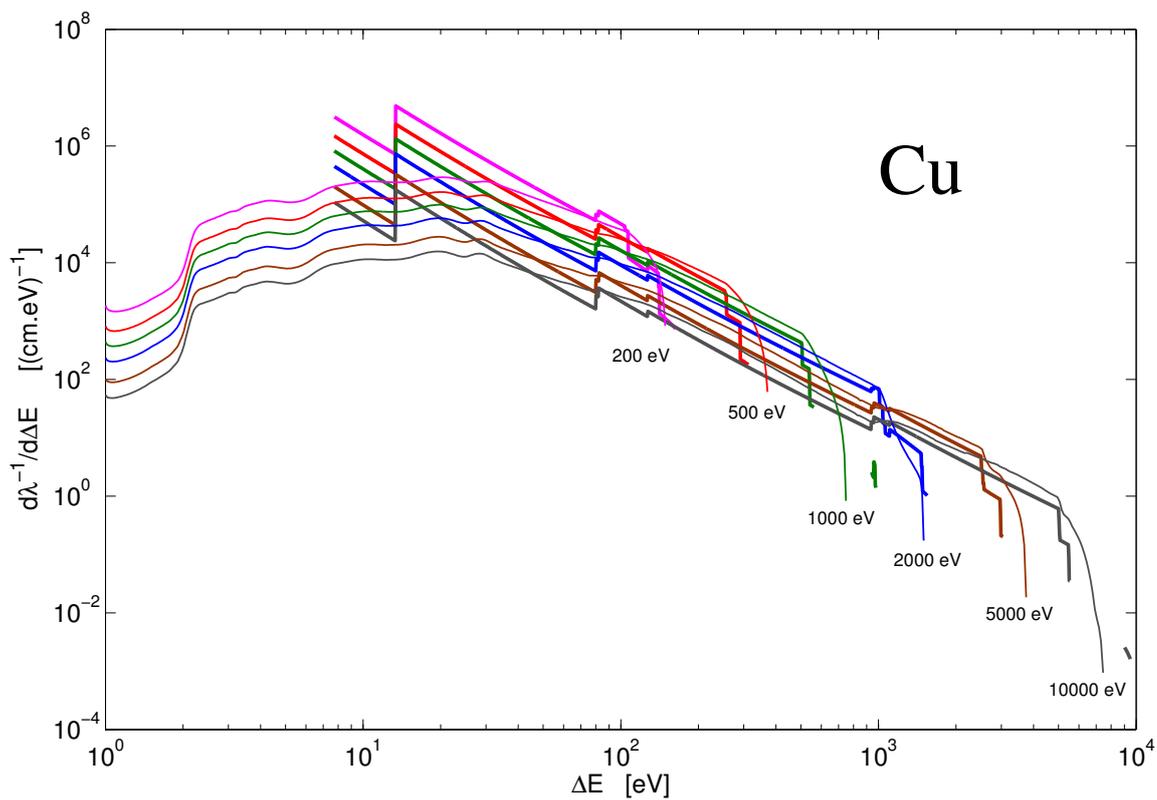


Рисунок 10 – То же, что на рисунке 9 для меди

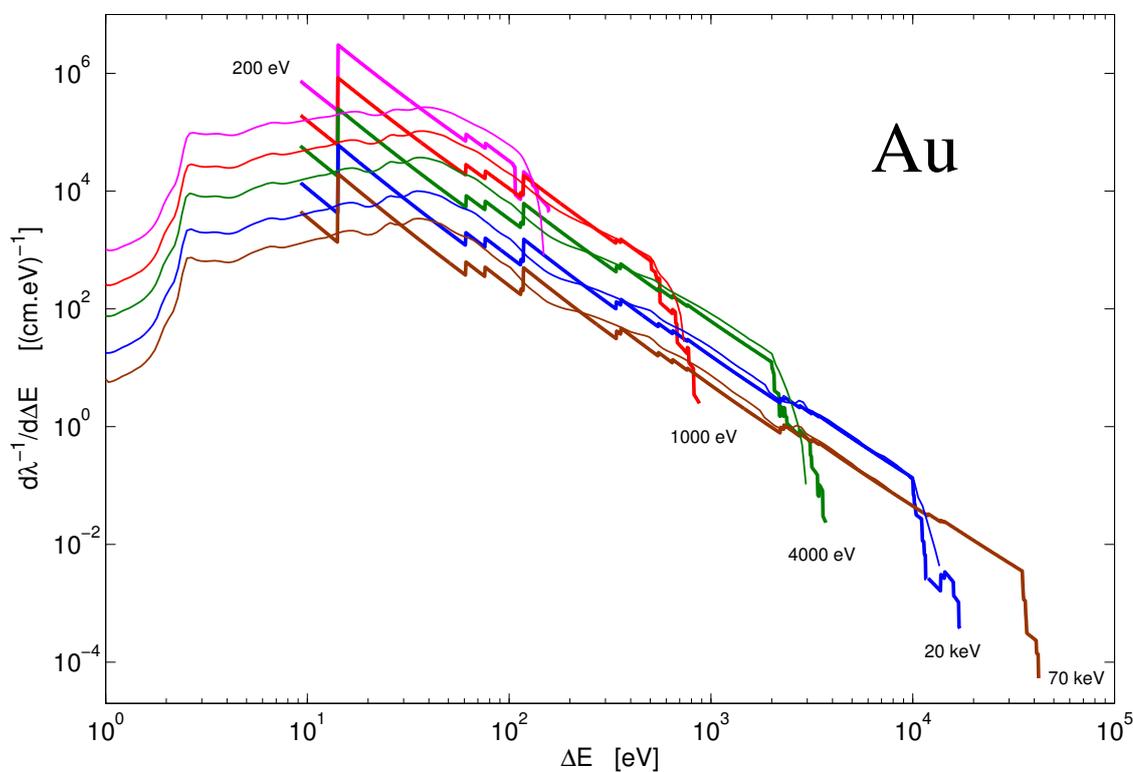


Рисунок 11 – То же, что на рисунке 9 для золота

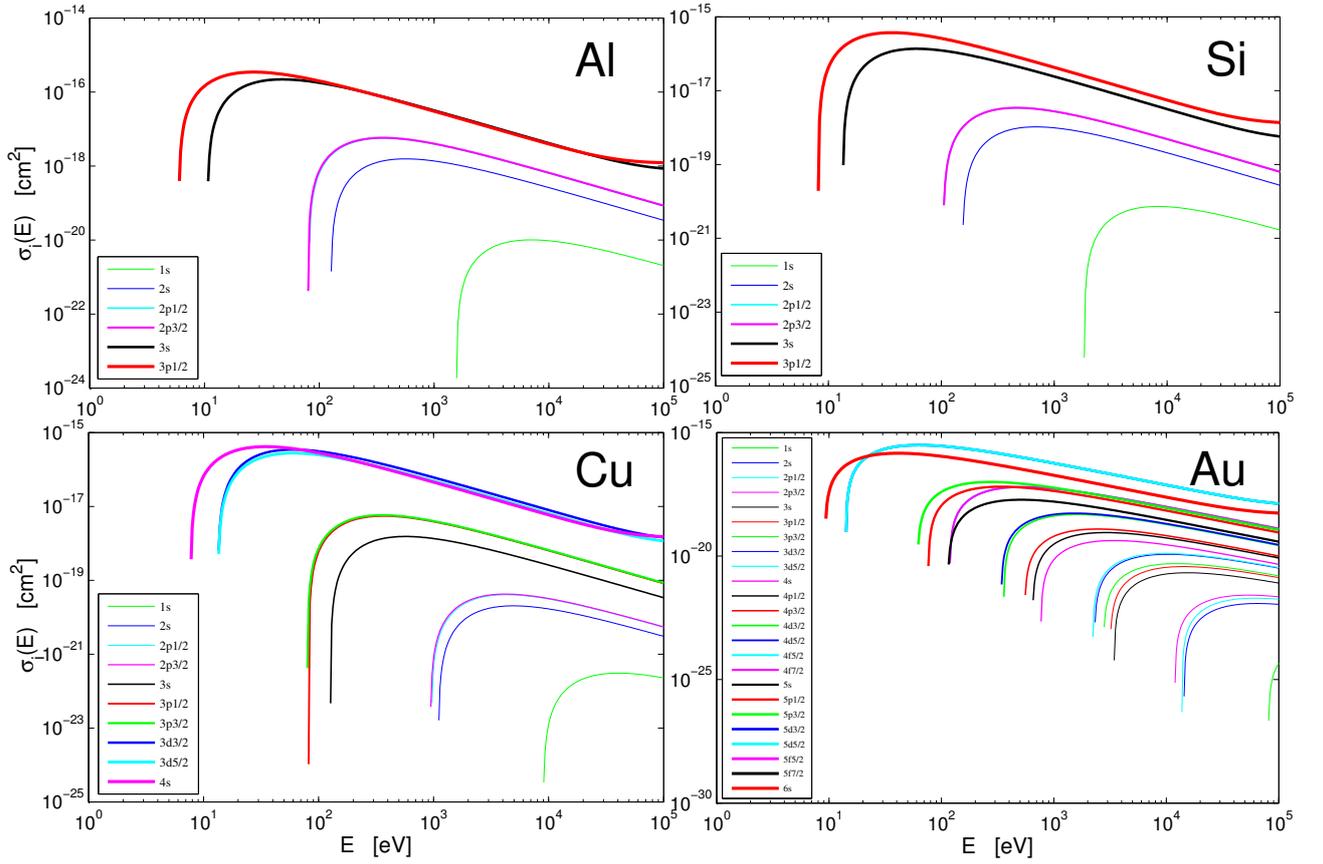


Рисунок 12 – Сечения рассеяния на каждой оболочке падающих электронов, рассеянных на атомах Al, Si, Cu, Au по теории Гризинского

ную длину свободного пробега при неупругом рассеянии

$$\lambda(E) = \frac{1}{n\sigma(E)}, \quad (3.6)$$

где  $n$  - концентрация атомов в веществе. Результаты вычисления длины свободного пробега в Al, Si, Cu и Au показаны на рисунке 14.

По определению среднего значения, средние потери энергии на ионизацию  $i$ -ой оболочки атома даются выражением

$$S_i(E, U_i) = n_i \int_{\Delta E_{\min}}^{\Delta E_{\max}} \Delta E \frac{\partial \sigma_i(E, U_i, \Delta E)}{\partial \Delta E} d(\Delta E). \quad (3.7)$$

Общие средние потери энергии при ионизации оболочек:

$$S(E) = \frac{1}{\sigma(E)} \sum_i n_i \int_{\Delta E_{\min}}^{\Delta E_{\max}} \Delta E \frac{\partial \sigma_i(E, U_i, \Delta E)}{\partial \Delta E} d(\Delta E). \quad (3.8)$$

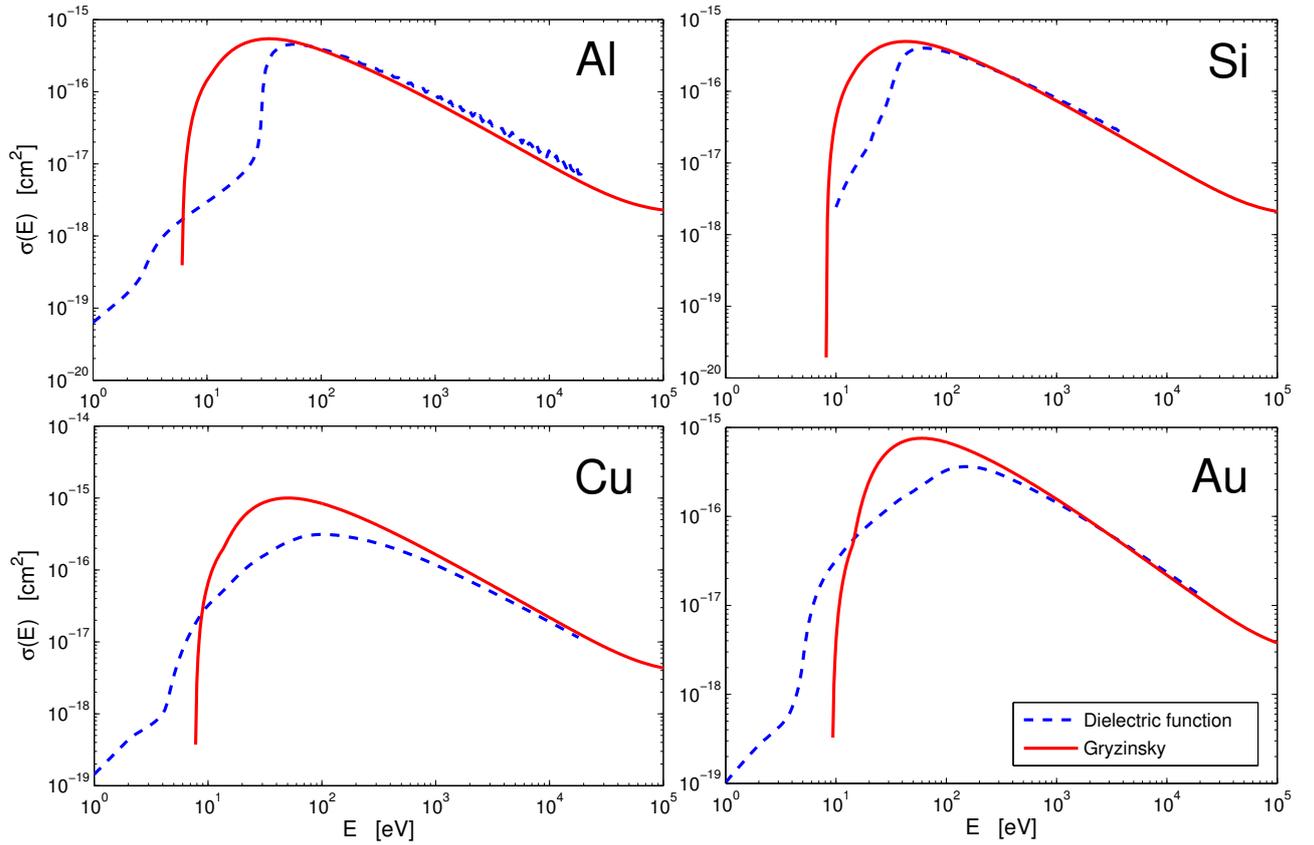


Рисунок 13 – Полные сечения рассеяния падающих электронов, рассеянных на атомах Al, Si, Cu, Au: сплошные линии – по теории Грызинского, штриховые линии – по оптическим данным

На рисунке 15 показаны зависимости средних потерь энергии при однократных столкновениях электрона с атомами Al, Si, Cu и Au. Потеря энергии при одном столкновении имеет значения порядка энергии связи электронов в атоме. Для кремния средние потери энергии при однократном столкновении достигают максимума при 20 - 30 кэВ и дальше с ростом энергии уменьшаются.

Тормозная способность вычисляется по формуле

$$-\frac{dE}{ds}(E) = nS(E)\sigma(E),$$

ИЛИ

$$-\frac{dE}{dS} = n \sum_i n_i \int_{\Delta E_{min}}^{\Delta E_{max}} \Delta E \frac{\partial \sigma_i(E, U_i, \Delta E)}{\partial \Delta E} d(\Delta E) \quad (3.9)$$

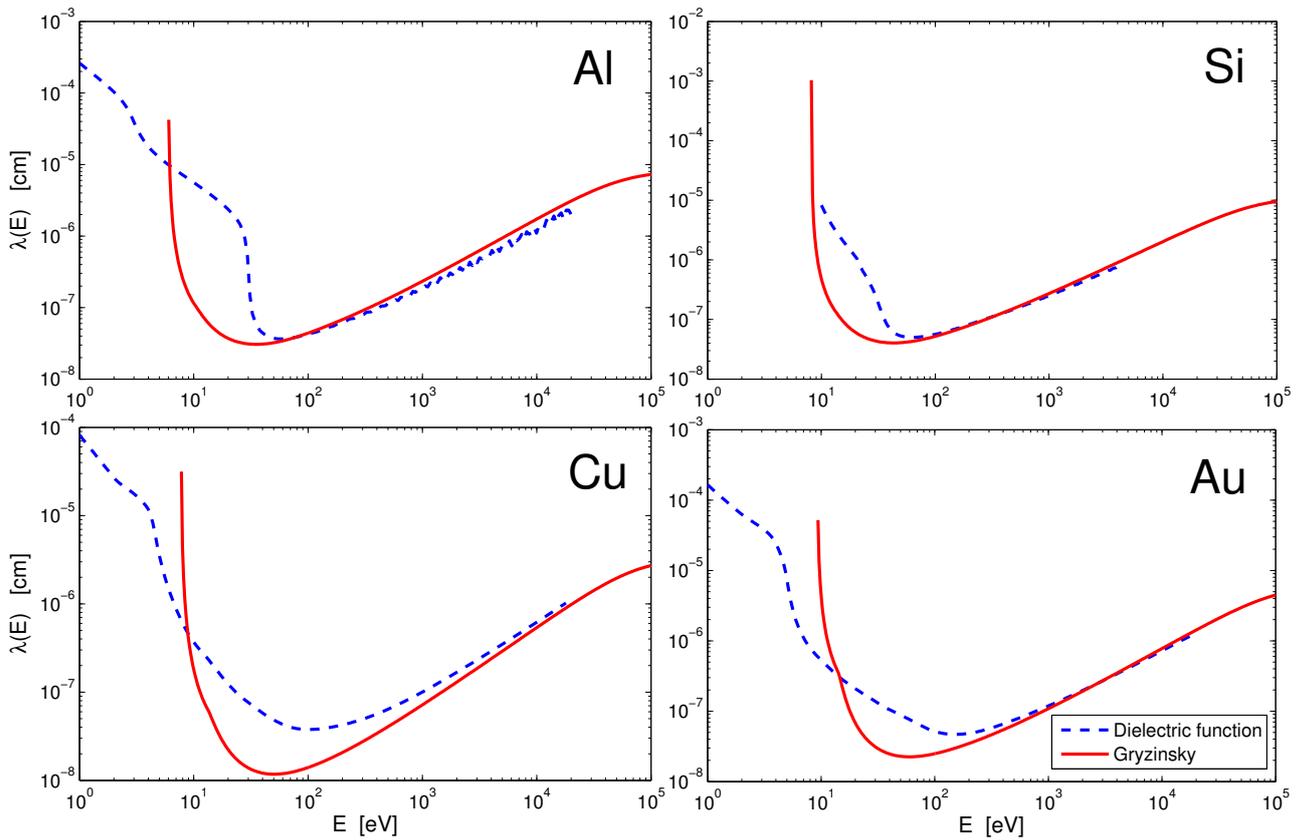


Рисунок 14 – Средние свободные пробеги электронов, рассеянных на атомах Al, Si, Cu, Au: сплошные линии – по теории Грызинского, штриховые линии – по оптическим данным

и приведены на рисунке 16. На этом графике, видны явные изгибы кривой тормозной способности кремния при значениях энергий налетающих электронов около 30 эВ и 200 эВ. Это явление можно объяснить следующим образом. В силу неразличимости электронов падающего и возникшего в результате ионизации атома после столкновения, максимальное значение потери энергии падающего электрона равно половине значения энергии падающего электрона до столкновения. Это значит, что электроны атомов кремния в оболочках  $3s$  и  $2p$  с энергиями связи 13,46 эВ и 104 эВ могут участвовать в процессе ионизации, если энергия падающего электрона превышает соответственно 27 эВ и 208 эВ. Поэтому при энергиях 27 эВ и 208 эВ, скорость изменения тормозной способности  $dE/ds$  изменяется и наклон кривой увеличивается. Теоретически могут существовать и другие изгибы, соответственные остальным

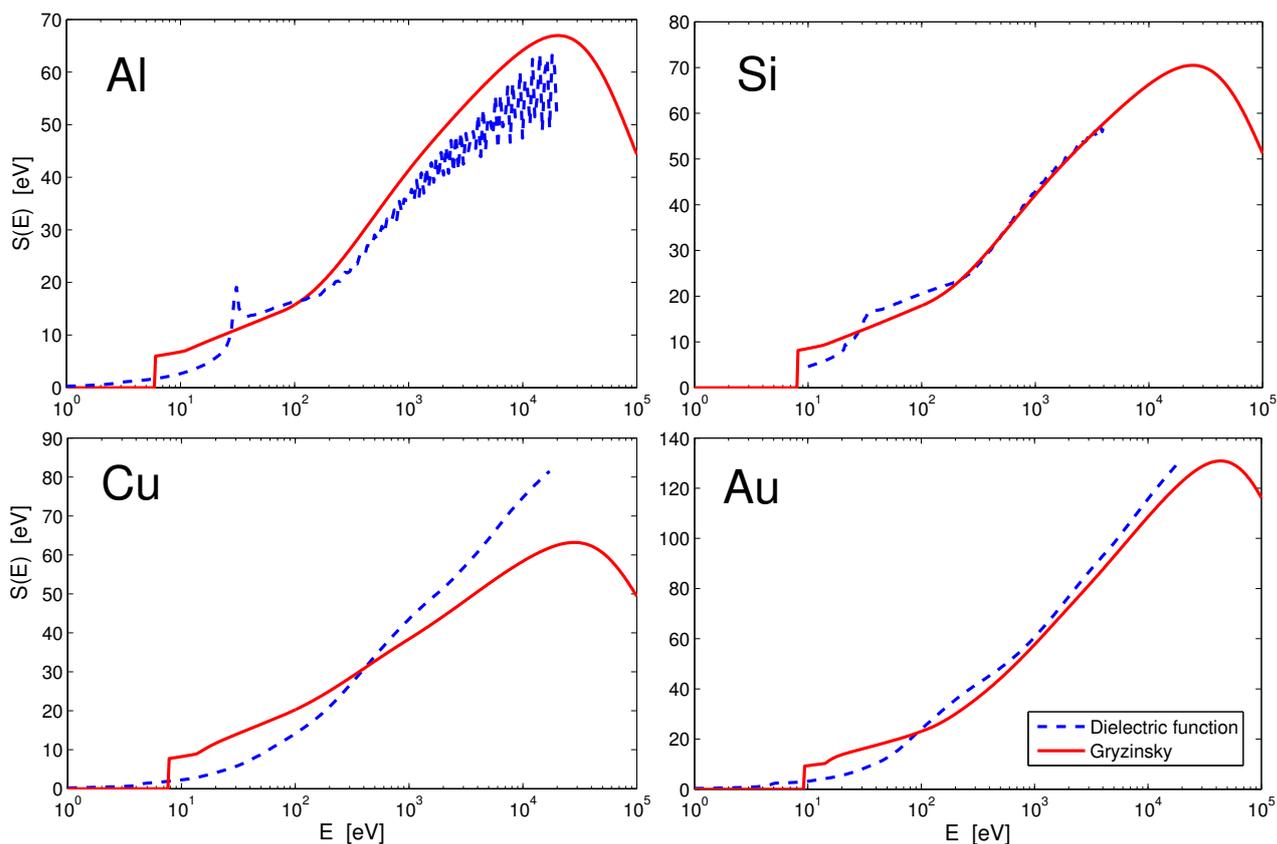


Рисунок 15 – Средние потери энергии при столкновении электрона с атомами Al, Si, Cu, Au: сплошные линии – по теории Гризинского, штриховые линии – по оптическим данным

значениям энергий связи, однако они незначительны и не видны на рисунке. Аналогичное явление имеет место и для других элементов.

Расчёты по формуле Гризинского при низких энергиях отсутствуют, так как налетающие электроны не имеют достаточно энергии для ионизации даже внешних электронов атомов. При этих энергиях происходит возбуждение коллективных колебаний валентных электронов в веществе - рождение плазмонов.

### 3.2 Сравнение с расчетом по экспериментально измеренной диэлектрической функции потерь

Дважды дифференциальный свободный пробег, т.е. вероятность того, что электрон или позитрон с энергией  $E$  передаст среде импульс  $q$  и потеряет

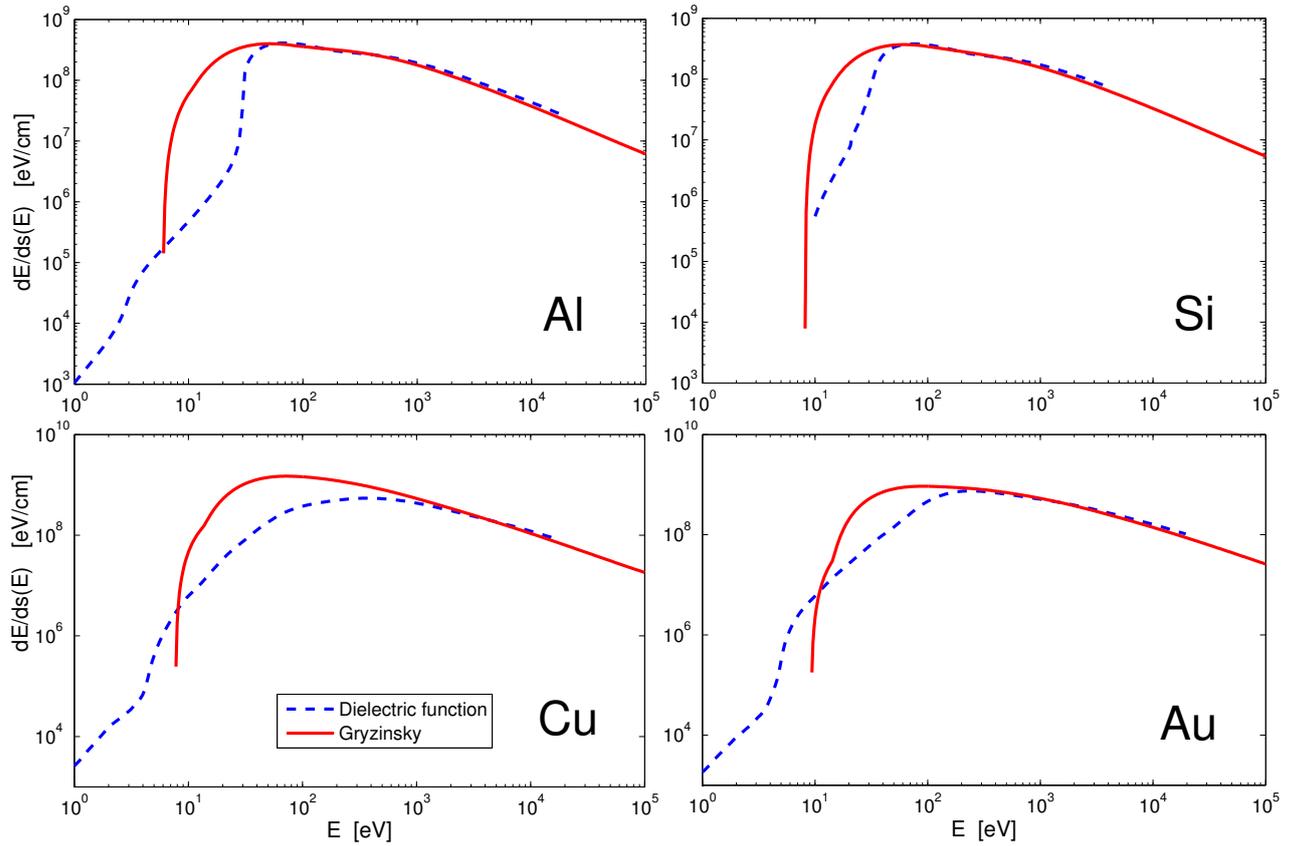


Рисунок 16 – Зависимости тормозной способности Al, Si, Cu, Au от энергии падающих электронов: сплошные линии – по теории Грызинского, штриховые линии – по оптическим данным

энергию  $\omega$  на единице пути, даётся выражением [9]

$$\frac{\partial^2 \lambda^{-1}}{\partial \omega \partial q} = \frac{1}{\pi E q} \text{Im} \left[ \frac{-1}{\varepsilon(q, \omega)} \right], \quad (3.10)$$

где  $\varepsilon(q, \omega)$  – комплексная диэлектрическая проницаемость. Здесь используются атомные единицы, в которых  $\hbar, m, e = 1$ .

Так как информация о диэлектрической проницаемости  $\varepsilon(q, \omega)$ , в основном, имеется в пределе  $q \approx 0$ , т.е. по оптическим измерениям, требуется связать  $\varepsilon(q, \omega)$  с оптическими данными  $\varepsilon(0, \omega)$ :

$$\varepsilon(0, \omega) = \frac{1}{(n(\omega) - ik(\omega))^2},$$

где  $n(\omega)$  – показатель преломления,  $k(\omega)$  – коэффициент поглощения, измеренные экспериментально.

В работе [9] приведена формула для вычисления дифференциального сечения и дифференциальной обратной длины в зависимости от потерянной энергии

$$\frac{\partial \lambda^{-1}}{\partial \omega}(E, \omega) = \frac{1}{2\pi E} \int_{\omega'_{\min}}^{\omega'_{\max}} d\omega' \omega' \operatorname{Im} \left[ \frac{-1}{\varepsilon(0, \omega')} \right] \frac{1}{\omega(\omega - \omega')}, \quad (3.11)$$

где

$$\omega'_{\min} = \begin{cases} 0, \omega \leq E/2 \\ 2\omega - E, E/2 < \omega \leq 3E/4 \end{cases},$$

$$\omega'_{\max} = 2\sqrt{E - \omega} \left( \sqrt{E} - \sqrt{E - \omega} \right), 0 < \omega \leq 3E/4.$$

Интегрирование дифференциального обратного среднего свободного пробега по всем допустимым значениям потерянной энергии  $\omega$  даёт длину свободного пробега

$$\lambda(E) = \left[ \int_{\omega_{\min}}^{\omega_{\max}} \frac{\partial \lambda^{-1}}{\partial \omega}(E, \omega) d\omega \right]^{-1}. \quad (3.12)$$

Тормозная способность, т.е. средняя потеря энергии на единице пути, даётся выражением

$$-\frac{dE}{ds}(E) = \int d\omega \omega \frac{\partial \lambda^{-1}}{\partial \omega}(E, \omega). \quad (3.13)$$

Результаты расчётов по формулам (3.11) – (3.13) для Al, Si, Cu и Au показаны также на рисунках 9, 13, 14, 15, 16 соответственно, где они сравниваются с результатами, наших вычислений, полученных по теории Гризинского. Из рисунков 13 - 16 видно, что в области энергии свыше 100 эВ расчёты по формуле Гризинского и по оптическим данным очень хорошо согласуются друг с другом. Отсюда можно заключить, что при высоких энергиях налетающих электронов, вероятность ионизации атома существенно превосходит вероятность возбуждения плазмонов, так как формула Гризинского предназначена только для вычисления ионизации.

### 3.3 Угловое распределение дифференциального сечения неупругого рассеяния по теории Гривинского

Потерянная энергия должна удовлетворять неравенствам

$$U_i \leq \Delta E \leq \frac{E + U_i}{2}. \quad (3.14)$$

После элементарных преобразований неравенств (3.14) с учетом формулы (1.13)

$$\vartheta = \arcsin \sqrt{\frac{\Delta E}{E}},$$

получаем предельные углы рассеяния

$$\arcsin \sqrt{\frac{U_i}{E}} \leq \vartheta \leq \arcsin \sqrt{\frac{E + U_i}{2E}}. \quad (3.15)$$

При больших энергиях падающих электронов,  $E \gg U_i$ :

$$\arcsin \sqrt{\frac{U_i}{E}} \leq \vartheta \leq \frac{\pi}{4}. \quad (3.16)$$

По определению дифференциального сечения углового рассеяния

$$\frac{d\sigma_{in}}{d\vartheta} = \frac{\partial\sigma_{in}}{\partial\Delta E} \frac{d\Delta E}{d\vartheta}, \quad (3.17)$$

где  $\frac{\partial\sigma_{in}}{\partial\Delta E}$  — дается формулами Гривинского (3.1) и (3.2).

Из (1.12) получаем

$$\frac{d\Delta E}{d\vartheta} = 2E \sin \vartheta \cos \vartheta. \quad (3.18)$$

В сферической системе координат

$$d\Omega = \sin \vartheta d\vartheta d\varphi.$$

В случае цилиндрической симметрии рассеяние происходит в элемент телесного угла

$$d\Omega = 2\pi \sin \vartheta d\vartheta. \quad (3.19)$$

Подставив (3.18) и (3.19) в (3.17), получим

$$\frac{d\sigma_{in}}{d\Omega} = \frac{\partial\sigma_{in}}{\partial\Delta E} \frac{E \cos \vartheta}{\pi}. \quad (3.20)$$

На рисунке 17 представлены угловые распределения дифференциального сечения неупругого рассеяния по теории Гризинского (3.20) и упругого рассеяния по модифицированной формуле Резерфорда–Мотта (2.15). Из рисунка 17 видно, что угловое рассеяние при неупругих столкновениях, полученное из формулы (3.20), становится существенным при энергиях электронов меньших сотен эВ. При больших энергиях, сечение упругого рассеяния значительно превышает сечение неупругого рассеяния во всех углах отклонения. По этой причине отклонением из-за неупругого столкновения можно пренебречь при больших энергиях. Это означает, что изменение направления движения электронов вызывается только упругими столкновениями, а неупругое рассеяние уменьшает скорость движения. Это обстоятельство применимо в модели непрерывного замедления.

### **3.4 Моделирование движения электронов методом Монте–Карло с учетом теории Гризинского**

Дифференциальное сечение неупругого рассеяния по Гризинскому дает детальную информацию для моделирования вылетающих из атома вторичных электронов, так как оно учитывает ионизацию отдельных оболочек атома и таким образом дает значение потерь энергии [14, 21]. Алгоритмы [13], приведенные в этой работе, немного отличаются от алгоритмов в других работах. Они основаны на характеристиках рассеяния по теории Гризинского: угловое рассеяние вычислено не только для упругих но и для неупругих соударений [22]; при этом моделирование движения электронов учитывает генерацию вторичных электронов [13].

Необходимо определить в какой оболочке атома происходит ионизация атомного электрона при столкновении с подающим электроном, какую энергию подающий электрон теряет и на какой угол он отклоняется.

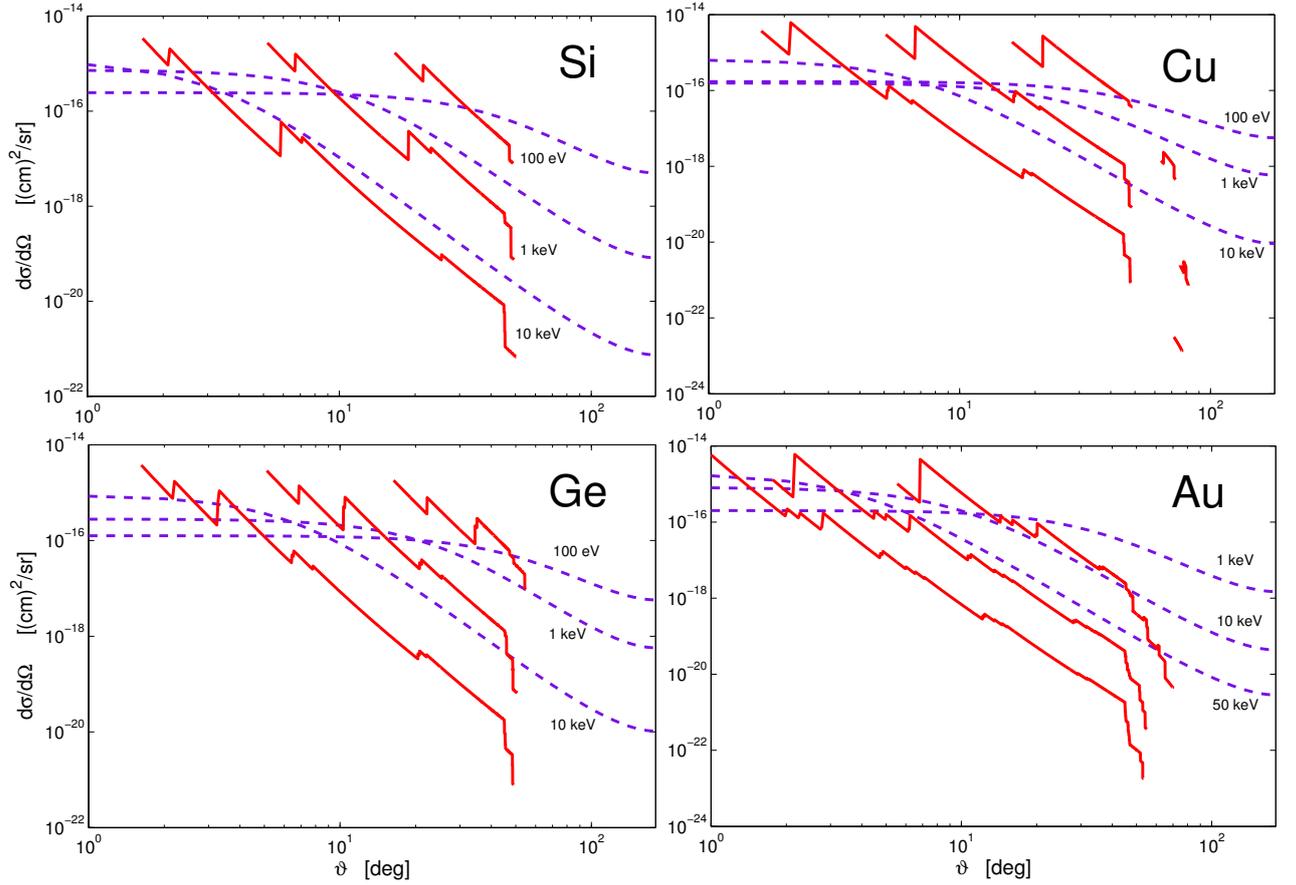


Рисунок 17 – Угловые распределения дифференциального сечения рассеяния электрона на атомах Si, Cu, Ge, Au при различных энергиях: сплошные линии — неупругое рассеяние по теории Гризинского, штриховые линии — упругое рассеяние по модифицированной формуле Резерфорда–Бете

Вероятность столкновения подающего электрона с электронными  $i$ -ой оболочки атома равна

$$p_i = \frac{\sigma_i(E, U_i)}{\sigma_{in}(E)}, \quad (3.21)$$

где  $\sigma_i(E, U_i)$  — сечение неупругого рассеяния в  $i$ -ой оболочке и вычисляется по формуле (3.4):

$$\sigma_i(E, U_i) = n_i \int_{\Delta E_{\min}}^{\Delta E_{\max}} \frac{\partial \sigma_i(E, U_i, \Delta E)}{\partial \Delta E} d(\Delta E),$$

а  $\sigma_{in}$  — полное сечение неупругого рассеяния, которое вычислено по формуле (3.5):

$$\sigma(E) = \sum_i \sigma_i(E, U_i).$$

Здесь  $\frac{\partial \sigma_i(E, U_i, \Delta E)}{\partial \Delta E}$  является дифференциальным сечением неупругого рассеяния по теории Гривинского (3.2):

$$\frac{\partial \sigma_i(E, U_i, \Delta E)}{\partial \Delta E} = \frac{\pi e^4 U_i}{\Delta E^3 E} \left( \frac{E}{E + U_i} \right)^{\frac{3}{2}} \left( 1 - \frac{\Delta E}{E} \right)^{\frac{U_i}{U_i + \Delta E}} \times \\ \times \left\{ \frac{\Delta E}{U_i} \left( 1 - \frac{U_i}{E} \right) + \frac{4}{3} \ln \left( 2.7 + \left( \frac{E - \Delta E}{U_i} \right)^{\frac{1}{2}} \right) \right\}.$$

Для оболочки, где  $E < U_i$

$$\sigma_i(E, U_i) = 0,$$

поэтому в этом случае:

$$p_i = 0.$$

Используем метод Монте-Карло, возьмем случайное число  $\xi$  от 0 до 1. Предположим, что ионизация будет происходить в  $k$ -ой оболочке, следующие неравенства должны выполняться:

$$\sum_{i=1}^k p_i \leq \xi \leq \sum_{i=1}^{k+1} p_i. \quad (3.22)$$

По формуле Гривинского (3.2), вероятность того, что подающий электрон теряет энергию от  $\Delta E$  до  $\Delta E + d\Delta E$  равна

$$\frac{n_k \frac{\partial \sigma_k(E, U_k, \Delta E)}{\partial \Delta E}}{\sigma_k(E, U_k)},$$

где  $n_k$  — число электронов в  $k$ -ой оболочке атома. Следовательно, вероятность того, что электрон теряет энергию от минимального возможного убыва энергии  $U_k$  до  $\Delta E$  равна

$$\omega(\Delta E) = \frac{n_k \int_{U_k}^{\Delta E} \frac{\partial \sigma_k(E, U_k, \Delta E)}{\partial \Delta E} d\Delta E}{\sigma_k(E, U_k)}. \quad (3.23)$$

Вероятность  $\omega(\Delta E)$  может принимать любое значение от 0 до 1. Таким образом, чтобы найти потерянную энергию, надо решить интегральное уравнение

по переменной  $\Delta E$  :

$$\frac{n_k}{\sigma_k(E, U_k)} \int_{U_k}^{\Delta E} \frac{\partial \sigma_k(E, U_k, \Delta E)}{\partial \Delta E} d\Delta E = \xi, \quad (3.24)$$

где  $\xi$  — случайное число от 0 до 1.

Атомный электрон  $k$ -ой оболочки получит энергию  $\Delta E$ . Если эта энергия больше энергии ионизации  $k$ -ой оболочки, то этот атомный электрон может покинуть атом и станет вторичным электроном. Начальная энергия вторичного электрона:

$$E_{sd} = \Delta E - U_k. \quad (3.25)$$

## Выводы по главе

В этой главе рассмотрены ряд характеристик неупругого рассеяния электронов с всеми простыми веществами с атомными номерами от 1 до 82. На этом основании построится подробный алгоритм столкновения электронов с атомами. С помощью четкого механизма столкновений по Гризинскому, рождение вторичных электронов выяснится, что в модели непрерывного замедления не может.

Возможно также вычислить характеристики неупругого рассеяния электронов с любым сложным веществом, состоящей из перечисленных выше элементов. Кроме того, расчеты в этой главе предоставляют данные по тормозной способности всех перечисленных простых и ряда сложных веществ для моделирования по модели непрерывного замедления, рассмотренного в следующей главе.

# Глава 4 Моделирование неупругих соударений электронов с атомами с использованием модифицированной формулы Бете

## 4.1 Аналитическая аппроксимация средней энергии возбуждения на основе модели атома Томаса–Ферми

### 4.1.1 Введение

Формула Бете-Блоха дает средние потери энергии на единице пути заряженной частицы в веществе – тормозную способность вещества. Важной характеристикой вещества, определяющей его тормозную способность, является средняя энергия возбуждения атомов вещества падающей заряженной частицей  $I(Z)$ , которая задает нижний предел при интегрировании по переданной энергии при вычислении тормозной способности. Эта величина считается не зависящей от заряда и энергии частицы и принимается одинаковой для электронов, протонов и альфа-частиц. Теоретическое вычисление величины  $I(Z)$  является нетривиальной задачей, так как детали электронной структуры вещества, строение электронных оболочек и химические связи оказывают влияние на спектр энергетических состояний и энергетические потери при возбуждении атомов вещества быстрой заряженной частицей. Использование экспериментально измеренных величин средней энергии возбуждения является неизбежной необходимостью до настоящего времени [29]. Рекомендуемые значения средней энергии возбуждения даны в работе [30] и докладе ICRU (International Commission on Radiation and Measurements) [31].

Целью настоящей работы является детальное сопоставление зависимости приведенной средней энергии возбуждения  $I(Z)/Z$  от заполнения оболочек атома и объяснение периодических изменений этой величины на основе рас-

ширенной таблицы элементов и модели атома Томаса–Ферми.

#### 4.1.2 Общие положения

В методе Томаса–Ферми предполагается, что электроны атома подчиняются статистике Ферми–Дирака и заполняют энергетические состояния в потенциальной яме, созданной кулоновским полем ядра, в соответствии с принципом неопределенностей. Из этих основных положений следует, что плотность электронов  $n(r)$ , импульс Ферми  $k_F(r)$ , потенциальная энергия  $U(r)$  и потенциал  $\varphi(r)$  связаны между собой соотношениями

$$n(r) = \frac{k_F^3(r)}{3\pi^2} = \frac{1}{3\pi^2} \frac{(2m_e)^{3/2}}{\hbar^3} [-U(r)]^{3/2} = \frac{1}{3\pi^2} \frac{(2m_e)^{3/2}}{\hbar^3} [e\varphi(r)]^{3/2}, \quad (4.1)$$

где  $e$  — элементарный заряд, заряд электрона равен  $-e$ ,  $m_e$  — масса электрона,  $\hbar$  — деленная на  $2\pi$  постоянная Планка, потенциальная энергия электрона  $U$  отсчитывается от уровня Ферми.

Подстановка этого соотношения в уравнение Пуассона

$$\Delta\varphi = \frac{1}{e} \Delta \left( \frac{p_F^2(r)}{2m_e} \right) = 4\pi en(r), \quad (4.2)$$

приводит к уравнению Томаса–Ферми для потенциала атома

$$\frac{d^2}{dr^2}(r\varphi) = -\frac{4e}{3\pi} \frac{(2m_e)^{3/2}}{\hbar^3} (-e\varphi)^{3/2}. \quad (4.3)$$

Вместо  $r$  в уравнении Томаса–Ферми (4.3) вводится новая переменная  $x$

$$x = \frac{r}{b}, \quad b = \frac{(3\pi)^{2/3}}{2^{7/3}} \frac{\hbar^2}{m_e e^2} Z^{-1/3} = 0.88534 r_B Z^{-1/3}, \quad (4.4)$$

где  $r_B = \hbar^2/m_e e^2 = 5.28 \cdot 10^{-9}$  см — первый боровский радиус. Это означает, что единицей длины выбрана величина  $b$ .

В новых переменных уравнение Томаса–Ферми принимает вид

$$\frac{d^2\Phi}{dx^2} = \frac{\Phi^{3/2}}{x^{1/2}} \quad (4.5)$$

и должно решаться с граничными условиями для нейтрального атома

$$\Phi(0) = 1; \quad \Phi(\infty) = 0. \quad (4.6)$$

Здесь  $\Phi$  — функция экранирования связанная с потенциалом атома выражением

$$\varphi(r) = \frac{Ze}{r} \Phi(r/b). \quad (4.7)$$

Заметим, что в уравнение Томаса–Ферми не входят какие-либо параметры вещества. Функция экранирования  $\Phi(x)$  в модели Томаса–Ферми является одинаковой для всех атомов.

Приведем уравнение (4.5) к системе двух обыкновенных дифференциальных уравнений первого порядка

$$\begin{cases} \frac{d\Phi_{TF}}{dx} = \xi, \\ \frac{d\xi}{dx} = \frac{\Phi_{TF}^{3/2}}{\sqrt{x}}. \end{cases} \quad (4.8)$$

Чтобы исключить расходимость при  $x = 0$ , положим нижнюю границу  $x_0$  равной радиусу ядра  $r_0$  и примем потенциал на границе ядра равным  $eZ/r_0$ .

Тогда первое граничное условие из (4.6) примет вид

$$\Phi_{TF}(x_0) = 1, \quad x_0 = \frac{r_0}{b}. \quad (4.9)$$

Так как область переменной  $x$ , в которой численно решается уравнение (4.5), должна быть ограничена некоторым верхним пределом, условие стремления потенциальной энергии к нулю на бесконечности зададим так:

$$\frac{d\Phi_{TF}}{dx} = -C, \quad x \rightarrow x_{max}, \quad (4.10)$$

где  $C$  — положительное число, которое следует выбрать таким образом, чтобы функция экранирования стремилась к нулю при увеличении  $x$  до некоторого заранее заданного значения  $x_{max}$ .

Для решения системы уравнений (4.8) с граничными условиями (4.9), (4.10) можно применить стандартный решатель системы обыкновенных дифференциальных уравнений, имеющийся в любом математическом пакете.

### 4.1.3 Оценка средней энергии возбуждения методом Томаса–Ферми

Оценка средней энергии возбуждения на основе модели атома Томаса–Ферми, выполненная Блохом [32] с помощью модели Томаса–Ферми, показала что  $I \sim Z$ , где  $C$  – некоторая константа [33]. Приведем аналогичную оценку выполненную Ландау [34]: «В квазиклассическом случае разностям уровней энергии соответствуют собственные частоты системы частиц. Средняя собственная частота атома порядка величины  $v_0/a_0$ ; поэтому мы можем заключить, что  $I \sim \hbar v_0/a_0$ . Скорости атомных электронов в модели Томаса–Ферми зависят от  $Z$ , как  $Z^{2/3}$ , а размеры атома – как  $Z^{-1/3}$ . Таким образом находим, что  $I$  должно быть пропорционально  $Z$ .» Эксперименты подтвердили эту оценку и показали, что величина средней энергии возбуждения деленной на  $Z$  колеблется около 10 эВ.

В предложенных до настоящего времени эмпирических формулах не учитывались периодическое изменение скорости возрастания  $I$  с увеличением  $Z$ . Выполним оценку зависимости  $I$  и от  $Z$ , исходя из определения  $I$ , данного Ландау в [34]. Эта величина определяется как некоторая средняя атомная энергия  $I$ , «называемая средней энергией возбуждения» и вычисляется по формуле

$$\ln I = \frac{\sum_n N_{0n} \ln(E_n - E_0)}{\sum_n N_{0n}} = \frac{1}{Z} \sum_n N_{0n} \ln(E_n - E_0). \quad (4.11)$$

Здесь сохранены обозначения собственных энергий состояний и чисел заполнения использованные в работе [34].

В модели Томаса–Ферми полная энергия электрона на расстоянии  $r$  от

ядра, т.е. его энергия связи, равна половине электростатической энергии, поскольку в системе частиц, взаимодействующих по закону Кулона, средняя кинетическая энергия равна минус половине средней потенциальной энергии (теорема вириала) [34]. Таким образом, энергия связи в атоме  $E_b$ , дается выражением

$$E_b(r) = -\frac{Ze^2}{2r}\Phi(r). \quad (4.12)$$

Определению (4.11) в модели Томаса–Ферми соответствует средний логарифм энергии связи электронов, в котором число состояний соответствует числу электронов в шаровом слое  $4\pi r^2 dr$  на расстоянии  $r$  ядра, а энергия связи дается выражением (4.12):

$$\begin{aligned} \ln I &= \frac{\int_0^\infty \ln(|E_b(r)|)n(r)4\pi r^2 dr}{\int_0^\infty n(r)4\pi r^2 dr} \\ &= \frac{1}{Z} \int_0^\infty \ln(|E_b(r)|)n(r)4\pi r^2 dr. \end{aligned} \quad (4.13)$$

Подставив в уравнение Пуассона (4.2) потенциал (4.7), получим плотность электронов выраженную через функцию экранирования

$$n(r) = \frac{Z}{4\pi r} \frac{d^2\Phi(r)}{dr^2}. \quad (4.14)$$

Подставив в выражение (4.13) энергию связи (4.12), плотность электронов (4.14) и выполнив интегрирование, получим

$$\begin{aligned} \ln I &= \frac{1}{Z} \int_0^\infty \ln\left(\frac{Ze^2}{2r}\Phi(r)\right) \left(\frac{Z}{4\pi r} \frac{d^2\Phi(r)}{dr^2}\right) 4\pi r^2 dr \\ &= \ln\left(\frac{Ze^2}{2b}\right) + \int_0^\infty \ln\left(\frac{\Phi}{x}\right) \frac{d^2\Phi(x)}{dx^2} x dx. \end{aligned} \quad (4.15)$$

Потенцируем выражение (4.15) и получаем среднюю энергию возбуждения в модели атома Томаса–Ферми

$$I = \frac{Ze^2}{2b} \exp\left(\int_0^\infty \ln\left(\frac{\Phi}{x}\right) \frac{d^2\Phi}{dx^2} x dx\right) = C Z^{4/3}, \quad (4.16)$$

где, в соответствии с (4.4),

$$C = \frac{e^2}{2 \cdot 0.88534a_0} \exp\left(\int_0^\infty \ln\left(\frac{\Phi}{x}\right) \frac{d^2\Phi}{dx^2} x dx\right). \quad (4.17)$$

Для оценки величины  $C$  можно воспользоваться приближением Мольер (4.18) для функции экранирования

$$\Phi(x) = \sum_{i=1}^3 B_i \exp(-\beta_i x). \quad (4.18)$$

где  $B_1 = 0.1$ ,  $B_2 = 0.55$ ,  $B_3 = 0.35$ ,  $\beta_1 = 0.6$ ,  $\beta_2 = 1.2$ ,  $\beta_3 = 0.3$ . Функция (4.18) отличается от точного решения не более, чем на 0.002, в области  $0 < x < 6$ . В этом приближении  $C = 1.58$  эВ.

Средняя энергия возбуждения в модели атома Томаса–Ферми (4.16) соответствует заполнению с ростом  $Z$  блоков  $s - d$ ,  $s - f - d$  и  $s - g - f - d$ . Полученное выражение дает качественную оценку измеряемым экспериментально величинам средней энергии возбуждения вещества. Формула (4.16) применима приблизительно для 3/4 атомов в шести компактных интервалах атомных номеров. На каждом интервале нужно подгонять величину  $C$  методом наименьших квадратов к данным ICRU [31]. В промежутках между этими интервалами можно также использовать степенную зависимость, показатель которой оказывается равным 1/2:

$$I = CZ^{1/2}. \quad (4.19)$$

где постоянные  $C$  находились подгонкой методом наименьших квадратов по экспериментальным данным ICRU [31].

Результаты расчета коэффициентов  $C$  в формулах (4.16) и (4.19) приведены в таблице 3 и изображены на рисунке 18. Обсуждаем полученные результаты.

Средний ионизационный потенциал, полученный из эксперимента и по формулам (4.16) и (4.19) возрастает при увеличении  $Z$ , но скорости возрастания различны на различных интервалах  $Z$ . Интервалами быстро возрастания, соответствующими формуле (4.16) с показателем степени 4/3, являются N–Ne (7–10), K–Zn (19–30), Rb–Cd (37–48), Cs–Hg (55–80), Fr–Cn (87–112) и

Таблица 3 – Коэффициенты в степенной аппроксимации зависимости средней энергии возбуждения вещества от атомного номера  $I = CZ^\alpha$

Период	Блок	Электронная конфигурация	Интервалы $Z$	$C$ , эВ	$\alpha$
1	s	H, He	1(H) - 2(He)		
2	s	[He] $2s^1 - 2s^2$	3(Li) - 4(Be)	32.6	1/2
	s-p p	[He] $2s^2 2p^1 - 2p^2$ [C] $2p^3 - 2p^6$	4(Be) - 6(C) 7(N) - 10(Ne)	6.18	4/3
3	s-p	[Ne] $3s^1 - 3s^2 3p^1 - 3p^6$	11(Na) - 18(Ar)	44.7	1/2
4	s-d	[Ar] $3d^1 - 3d^{10} 4s$	19(K) - 30(Zn)	3.68	4/3
	p	[Zn] $4p^1 - 4p^6$	31(Ga) - 36(Kr)	59.8	1/2
5	s-d	[Kr] $4d^1 - 4d^{10} 5s$	37(Rb) - 48(Cd)	2.86	4/3
	p	[Cd] $5p^1 - 5p^6$	49(In) - 54(Xe)	67.8	1/2
6	s-f-d	[Xe] $4f^1 - 4f^{14} 5d^1 - 5d^{10} 6s$	55(Cs) - 80(Hg)	2.34	4/3
	p	[Hg] $6p^1 - 6p^6$	81(Tl) - 86(Rn)	89.4	1/2
7	s-f-d	[Rn] $5f^1 - 5f^{14} 6d^1 - 6d^{10} 7s$	87(Fr) - 112(Cn)	2.16	4/3
	p	[Cn] $7p^1 - 7p^6$	113(Uut) - 118(Uuo)	110	1/2
8	s-g-f-d	[Uuo] $5g^{1-18} 6f^{1-14} 7d^{1-10} 8s$	119(Uue) - 126(Uhb)	$\simeq 2.1$	4/3

элементы с атомными номерами от 119 до 126. В этих интервалах, кроме N–Ne (7–10), происходит заполнение электронами оболочек в блоках  $f$  и  $d$ . Интервалами медленного возрастания, соответствующими формуле (4.19) с показателем степени 1/2, являются Be–C (4–6), Na–Ar (11–18), Ga–Kr (31–36), In–Xe (49–54), Tl–Rn (81–86) и элементы с атомными номерами от 113 до 118. В этих оболочках электроны заполняются по внешним  $p$ -оболочкам.

Отметим, что модель атома Томас-Ферми позволяет предсказать величины средних энергий возбуждений элементов с атомными номерами большими 100, для которых экспериментальные данные не существуют. Для элементов от 101 до 112 продолжается заполнение электронами внутренних  $f$  и  $d$  оболочек, поэтому для этих элементов сохраняются коэффициенты  $C$  и  $\alpha$  установленные по экспериментальным данным для  $Z$  от 87 до 100. Для  $Z$  от 113 до 118 происходит заполнение внешней  $p$ -оболочки, и показатель  $\alpha$  дол-

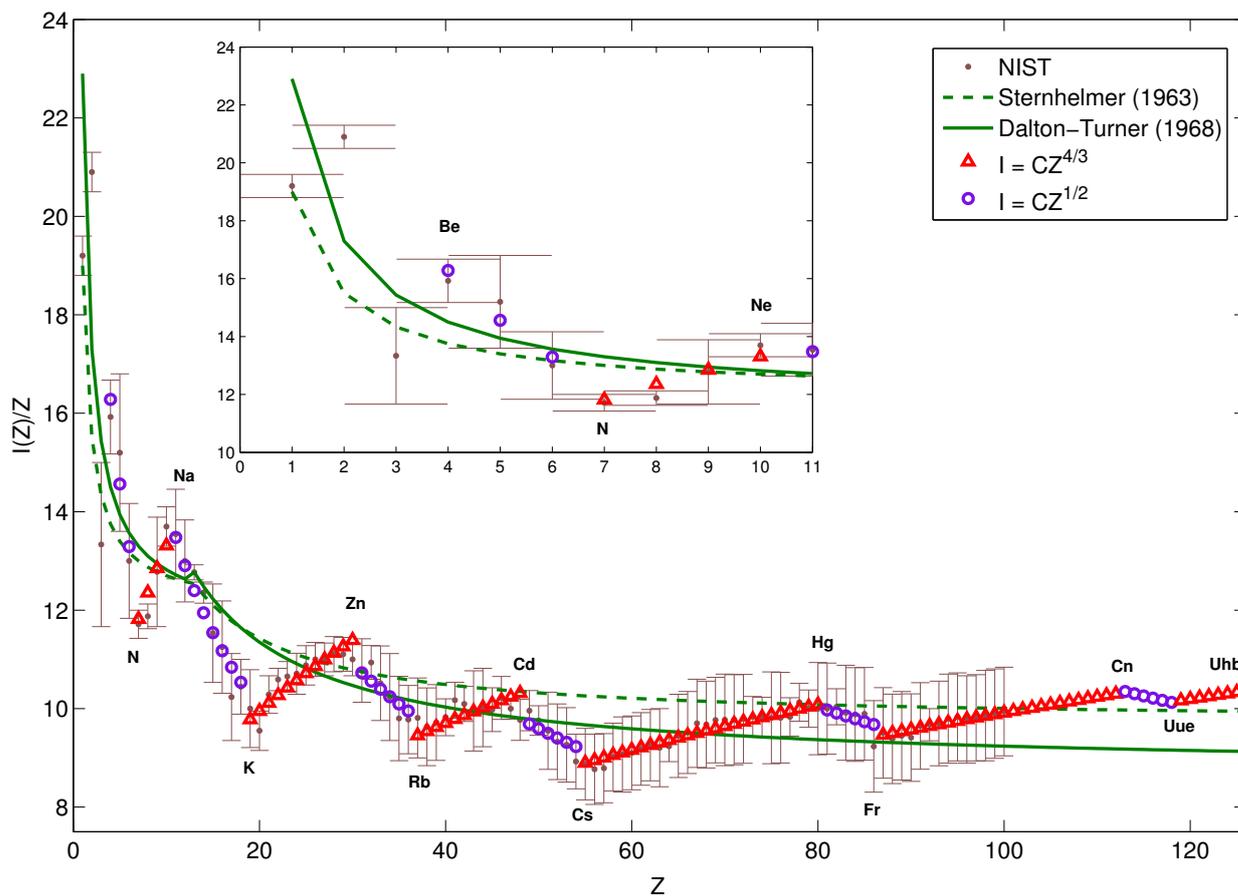


Рисунок 18 – Средняя энергия возбуждения отнесенная к атомному номеру элемента: маленькие круглые метки — по данным ICRU [31]; большие круглые и треугольные метки — результаты настоящей работы; сплошная линия — по эмпирической формуле (4.23); пунктирная линия — по эмпирической формуле (4.22)

жен быть приблизительно  $1/2$ . При  $Z$  от 119 до 126 заполняется внутренняя  $6f$ -оболочка, и показатель  $4/3$ . Сшивание этих зависимостей дает величины коэффициентов  $C$  для интервалов  $Z$ .

Заметим, что интервалы  $Z$  связаны с периодической системой химических элементов длиннопериодной формы, утвержденной Международным союзом теоретической и прикладной химии (IUPAC) в качестве основной. Атомные номера 11, 19, 37, 55, 87 соответствуют щелочным элементам Na, K, Rb, Cs и Fr. Атомные номера 30, 48, 80 соответствуют последним переходным металлам Zn, Cd и Hg. В каждом периоде, область сильного возрастания начинается щелочным металлом, заканчивается последним переходным металлом,

затем начинается область слабого возрастания, которая заканчивается элементом инертного газа.

Отклонение величин  $I(Z)$ , вычисленных по формулам (4.16), (4.19) с коэффициентами пропорциональности, найденными подгонкой к величинам, рекомендованным ICRU [31], как показано на рисунке 19, не превышает нескольких процентов. На интервале атомных номеров  $Z \in [4, 100]$ , среднее относительное отклонение

$$M = \frac{1}{97} \sum_{i=4}^{100} \left| \frac{I_{ICRU}(Z_i) - I(Z_i)}{I_{ICRU}(Z_i)} \right| = 0.0142, \quad (4.20)$$

а дисперсия составляет всего

$$\sigma = \sqrt{\frac{1}{96 \cdot 97} \sum_{i=4}^{100} \left( \left| \frac{I_{ICRU}(Z_i) - I(Z_i)}{I_{ICRU}(Z_i)} \right| - M \right)^2} = 0.0025. \quad (4.21)$$

Для вычисления средней энергии возбуждения атома часто используют эмпирические выражения приведенные в обзоре [35]

$$I_S = \begin{cases} 12 + 7/Z, & Z < 13; \\ (9.76 + 58.8Z^{-1.19})Z, & Z \geq 13. \end{cases} \quad (4.22)$$

$$I_{DT} = \begin{cases} 11.2 + 11.7 Z, & Z \leq 13; \\ 52.8 + 8.71 Z, & Z > 13. \end{cases} \quad (4.23)$$

Однако эти эмпирические формулы не отражают периодических свойств зависимости  $I(Z)/Z$  от  $Z$ , и, как можно видеть из рисунки 18, не так точно, как предлагаемые нами формулы (4.16) и (4.19), аппроксимируют зависимость средней энергии возбуждения от атомного номера. Кроме того, предлагаемая нами формула (4.16) дает величины средней энергии возбуждения еще не открытых, но теоретически предсказанных тяжелых нестабильных элементов [36].

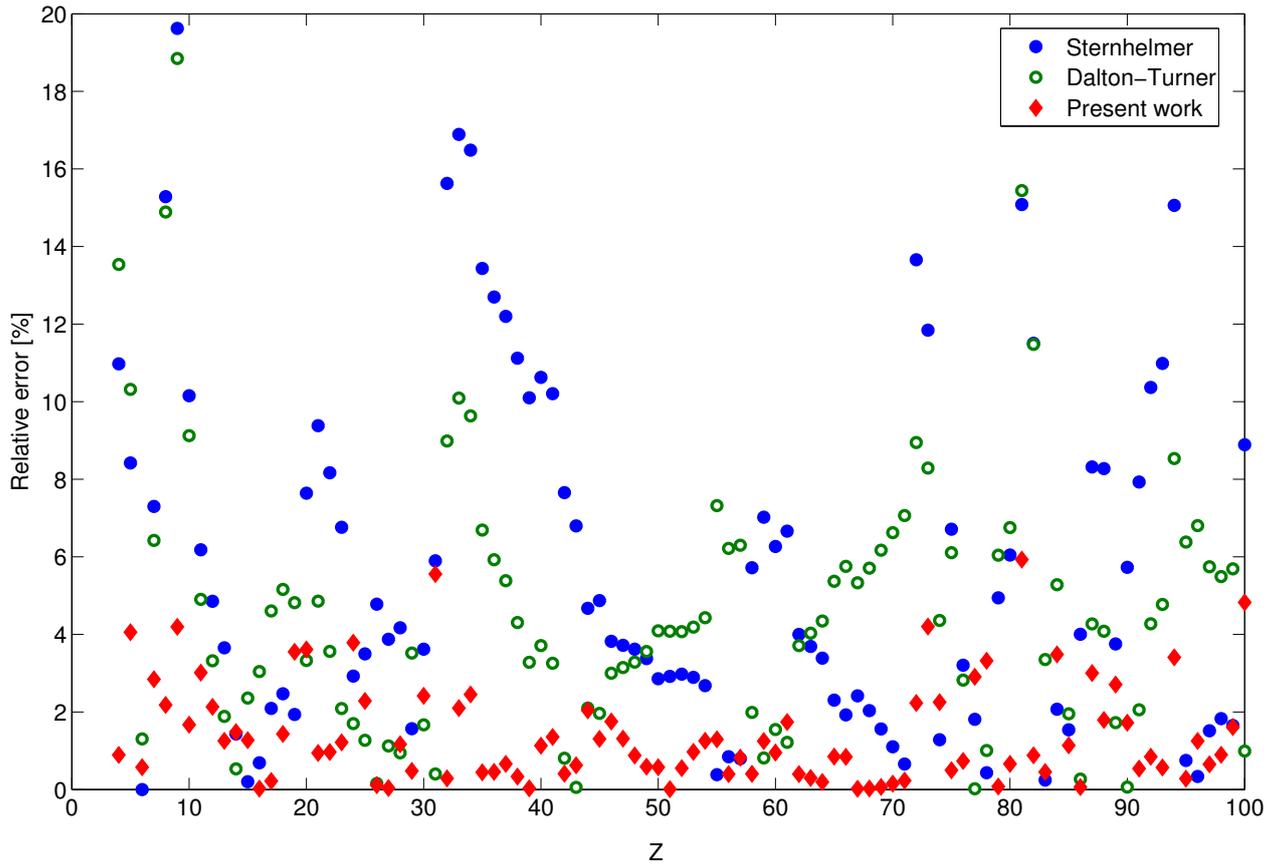


Рисунок 19 – Отклонения экспериментальных данных от вычисленных по предложенной нами формулам (4.16), (4.19) (ромбы) и по эмпирическим формулам (4.22), (4.23) (кружки)

## 4.2 Аналитическая формула тормозной способности Бете

с эффективным атомным номером и эффективным ионизационным потенциалом

### 4.2.1 Экстраполяция формулы Бете на область малых и средних энергий электронов

Известная формула тормозной способности Бете позволяет вычислять тормозную способность вещества для энергий электронов превышающих энергию связи электронов  $K$ -оболочки. Соответствующие вычисления протабулированы и доступны на сайте NIST [11]. Однако для многих приложений важная область энергии электронов находится ниже этой границы. Суще-

ствуют аналитические формулы позволяющие приблизительно оценить тормозную способность для таких энергий электронов, полученные введением в формулу Бете эмпирических подгоночных параметров, в частности это широко используемая в настоящее время формула Джоя (Joy) [37]. Более точные величины тормозной способности в области средних и малых энергий получены на основе диэлектрического формализма с использованием оптических экспериментальных данных по измерениям коэффициентов преломления и поглощения в области от единиц эВ до 30 кэВ Пауэлом [38]. Однако такие данные существуют лишь для ограниченного набора веществ.

Теоретические вычисления вкладов в тормозную способность каждой оболочки атомов вещества по алгоритму предложенному Гризинским [8] могут быть выполнены для любого вещества, так как в расчете используются только таблицы энергий связи оболочек атомов, которые опубликованы в виде таблиц для любых веществ, например, такие таблицы приводятся в NIST [11]. Как показано в [14], такие вычисления дают результаты близкие к полученным на основе диэлектрического формализма Пауэла [38].

При уменьшении энергии электронов происходит выключение из взаимодействия с падающим электроном оболочек атома-мишени, что отчетливо видно при использовании алгоритма вычислений Гризинского, так что эффективное число взаимодействующих электронов  $Z_{eff}$  и средняя энергия ионизации вещества  $I_{eff}$  уменьшаются с уменьшением энергии падающего электрона. Как показано в работе [39], введение в формулу тормозной способности Бете  $Z_{eff}$  и  $I_{eff}$  позволяет экстраполировать эту формулу на область средних и малых энергий. Однако предложенный в [39] способ нахождения  $Z_{eff}$  и  $I_{eff}$  требует знания диэлектрических данных для вещества в области энергий, представляющих интерес для данной задачи – от единиц эВ до десятков кэВ – что ограничивает применимость метода.

В данной Главе экстраполяция формулы Бете на область малых и средних энергий электронов производится с учетом выключения оболочек атома из взаимодействия с падающим электроном по теории Гривинского, устраняющая недостаток диэлектрического формализма, заключающийся в необходимости иметь надежные экспериментальные данные по измерению коэффициентов преломления и поглощения в области энергий фотонов - от единиц эВ до десятков кэВ.

#### 4.2.2 Вычисление эффективного числа взаимодействующих электронов и средней энергии ионизации

Формула Бете для тормозной способности нерелятивистских электронов дается выражением предложенным Вавиловым [7]:

$$-\frac{dE}{ds} = 4\pi n Z r_e^2 \frac{m_e c^2}{\beta^2} \ln \left( \frac{1.166 m_e^2 c^2 \beta^2}{2I(Z)} \right), \quad (4.24)$$

где  $E$  — кинетическая энергия электрона,  $s$  — длина пути электрона в веществе,  $n$  — плотность атомов,  $Z$  — атомный номер,  $r_e = e^2/(m_e c^2)$  — классический радиус электрона,  $e$  — заряд электрона,  $m_e$  — масса электрона,  $c$  — скорость света,  $\beta$  — скорость электрона измеренная в единицах скорости света,  $I(Z)$  — средний ионизационный потенциал при больших энергиях электронов. Общая для любых энергий связь между скоростью электронов и их кинетической энергией (в единицах  $m_e c^2$ ) имеет вид

$$\beta^2 = \frac{T(T+2)}{(T+1)^2}. \quad (4.25)$$

Будем искать эффективные атомные номера  $Z_{eff}(E)$  и эффективные средние энергии ионизации вещества  $I_{eff}(Z, E)$  для всех элементов и любых химических соединений этих элементов, полагая что для соединений

$$\begin{aligned} Z_{eff} &= \sum a_i Z_{i,eff}, \\ I_{eff} &= \sum a_i I_{i,eff}, \end{aligned} \quad (4.26)$$

где  $a_i$  — число атомов  $i$ -го сорта отнесенное к числу атомов всех сортов в данном химическом соединении.

Тогда функция Бете примет вид:

$$-\frac{dE}{ds} = 4\pi n Z_{eff}(E) r_e^2 \frac{m_e c^2}{\beta^2} \ln \left( \frac{1.166 m_e^2 c^2 \beta^2}{2 I_{eff}(Z, E)} \right). \quad (4.27)$$

В качестве эффективного атомного номера введем в уравнение (4.27)  $Z_{eff}(E)$  — число электронов на оболочках, энергии связи которых меньше  $E/2$  в силу принципа неразличимости падающего и выбитого из атома электронов:

$$Z_{eff}(E) = Z \left[ 1 - \exp \left( -A_Z \left( \frac{E}{I(Z)} \right)^{\alpha_Z} \right) \right]. \quad (4.28)$$

где  $A_Z$  и  $\alpha_Z$  — коэффициенты подгонки.

В качестве эффективной средней энергии ионизации введем функцию:

$$I_{eff}(Z, E) = I(Z) \left[ 1 - \exp \left( -A_I \left( \frac{E}{I(Z)} \right)^{\alpha_I} \right) \right], \quad (4.29)$$

где  $A_I$  и  $\alpha_I$  — не зависящие от энергии электронов подгоночные коэффициенты для данного элемента с атомным номером  $Z$ .

Для средней энергии ионизации вещества  $I(Z)$  используются подгоночные формулы (4.16) и (4.19) методом наименьших квадратов к данным ICRU [31]. Этот вопрос мы обсуждали в предыдущем разделе.

Найденные методом наименьших квадратов коэффициенты подгонки  $A_Z$  и  $\alpha_Z$  формулы эффективного атомного номера (4.28) приведены в таблице 4. Энергетические зависимости эффективного атомного номера и их аппроксимации для Si, Cu, Ge и Au показаны на рисунке 20.

Таблица 4 – Коэффициенты аппроксимации для формул (4.28) и (4.29)

$Z$	Элемент	Коэффициенты аппроксимации для $Z_{eff}$		Коэффициенты аппроксимации для $I_{eff}$ по Powell [38]		Коэффициенты аппроксимации для $I_{eff}$ по Гризинско- му [14]	
		$A_Z$	$\alpha_Z$	$A_I$	$\alpha_I$	$A_I$	$\alpha_I$
1	H	$1.0463 \cdot 10^{-7}$	43.998781	–	–	3.363010	3.999190
2	He	$5.8790 \cdot 10^{-8}$	104.772022	–	–	1.660427	14.405277
3	Li	0.379022	0.990984	0.189391	1.649775	0.588098	0.787156
4	Be	0.576275	0.757835	0.288108	0.722268	0.542035	0.558659
5	B	0.636467	0.668926	–	–	0.512548	0.514756
6	C	0.672319	0.663132	0.392842	0.247391	0.547196	0.490130
7	N	0.874060	0.520486	–	–	0.254303	0.412693
8	O	0.991191	0.897652	–	–	0.594914	0.587267
9	F	1.595289	1.383996	–	–	0.762037	0.746499
10	Ne	1.928702	1.643997	–	–	0.832296	0.804281
11	Na	1.189103	1.482922	0.568178	1.176053	0.755687	1.083771
12	Mg	0.800993	1.148078	0.320342	1.071578	0.585955	0.892135
13	Al	0.679680	0.914945	0.346115	1.145811	0.443498	0.727412
14	Si	0.642708	0.803677	0.311870	1.041756	0.402741	0.647939
15	P	0.616792	0.739455	–	–	0.388924	0.593251
16	S	0.611135	0.668703	–	–	0.337162	0.538081
17	Cl	0.600434	0.654174	–	–	0.357245	0.518531
18	Ar	0.588137	0.641147	–	–	0.379044	0.502370
19	K	0.561069	0.643979	0.236765	0.660836	0.467409	0.726421
20	Ca	0.554647	0.639102	–	–	0.411528	0.678149
21	Sc	0.601034	0.591728	0.500000	0.770000	0.353843	0.621683
22	Ti	0.617810	0.581071	0.201955	0.334044	0.346725	0.614040
23	V	0.635473	0.571184	0.278708	0.324368	0.338234	0.611693
24	Cr	0.674808	0.533282	0.351170	0.457798	0.263584	0.544992
25	Mn	0.671171	0.557198	–	–	0.345672	0.614678
26	Fe	0.691799	0.549429	0.402591	0.539617	0.332117	0.599563

продолжение следует

(продолжение)

$Z$	Элемент	$A_Z$	$\alpha_Z$	$A_I$ по [38]	$\alpha_I$ по [38]	$A_I$ по [14]	$\alpha_I$ по [14]
27	Co	0.711381	0.543600	0.307824	0.349251	0.326712	0.599817
28	Ni	0.728360	0.538380	0.338524	0.393381	0.322871	0.604048
29	Cu	0.780981	0.494114	0.408612	0.490635	0.222936	0.501415
30	Zn	0.741849	0.536729	–	–	0.321211	0.583340
31	Ga	0.756337	0.516575	–	–	0.335916	0.640806
32	Ge	0.715613	0.549247	0.337717	0.630754	0.367157	0.649760
33	As	0.686318	0.575018	–	–	0.387076	0.652144
34	Se	0.660903	0.581482	–	–	0.364849	0.645414
35	Br	0.639557	0.591651	–	–	0.357055	0.623174
36	Kr	0.620079	0.598515	–	–	0.359592	0.609356
37	Rb	0.565239	0.640445	–	–	0.472210	0.776436
38	Sr	0.573381	0.620852	–	–	0.419247	0.728917
39	Y	0.579726	0.600750	0.164352	0.513554	0.339569	0.681062
40	Zr	0.575169	0.595634	–	–	0.317761	0.657444
41	Nb	0.574533	0.580189	0.227564	0.441259	0.272433	0.619886
42	Mo	0.544503	0.576834	0.196250	0.415435	0.247467	0.586822
43	Tc	0.579799	0.573482	–	–	0.302748	0.634353
44	Ru	0.592138	0.550457	0.206260	0.368821	0.242856	0.576853
45	Rh	0.597128	0.542080	0.180003	0.302006	0.240654	0.572389
46	Pd	0.622648	0.504196	0.178210	0.276553	0.147054	0.465620
47	Ag	0.605354	0.529577	0.120015	0.075459	0.249209	0.579541
48	Cd	0.595888	0.530255	–	–	0.259393	0.575984
49	In	0.589700	0.528030	0.186395	0.354748	0.304623	0.653166
50	Sn	0.573374	0.538394	0.189388	0.346934	0.316830	0.650662
51	Sb	0.558229	0.548428	–	–	0.326715	0.650575
52	Te	0.548779	0.549098	–	–	0.311220	0.639919
53	I	0.536391	0.552602	–	–	0.305357	0.624161
54	Xe	0.526651	0.555211	–	–	0.305256	0.611381
55	Cs	0.514754	0.559494	0.198361	0.665767	0.426540	0.765564
56	Ba	0.504128	0.567382	–	–	0.375890	0.729907
57	La	0.520553	0.546708	–	–	0.302475	0.674465

продолжение следует

(продолжение)

$Z$	Элемент	$A_Z$	$\alpha_Z$	$A_I$ по [38]	$\alpha_I$ по [38]	$A_I$ по [14]	$\alpha_I$ по [14]
58	Ce	0.513409	0.558548	–	–	0.314782	0.681982
59	Pr	0.518671	0.555751	–	–	0.311431	0.681329
60	Nd	0.524877	0.552576	–	–	0.305083	0.676053
61	Pm	0.532644	0.547486	–	–	0.293610	0.666557
62	Sm	0.540636	0.542253	–	–	0.288744	0.662416
63	Eu	0.546034	0.538974	–	–	0.286815	0.661512
64	Gd	0.559173	0.525777	0.158864	0.477773	0.306215	0.676407
65	Tb	0.564071	0.524211	0.092249	0.290000	0.297786	0.674763
66	Dy	0.564052	0.532112	0.100113	0.291195	0.255943	0.632776
67	Ho	0.568492	0.531138	–	–	0.246427	0.623598
68	Er	0.572937	0.529214	–	–	0.243586	0.620453
69	Tm	0.577381	0.529055	–	–	0.232477	0.609299
70	Yb	0.581327	0.528577	–	–	0.225239	0.601983
71	Lu	–	–	–	–	–	–
72	Hf	0.590622	0.520502	0.192876	0.420975	0.290121	0.667806
73	Ta	0.591531	0.519819	0.184192	0.415025	0.301953	0.668701
74	W	0.593447	0.517204	0.195590	0.430327	0.314882	0.679337
75	Re	0.594729	0.517843	0.185570	0.411722	0.328150	0.690899
76	Os	0.596652	0.515963	0.216418	0.451349	0.319688	0.679397
77	Ir	0.598781	0.514613	0.201654	0.436313	0.318254	0.676888
78	Pt	0.604101	0.505798	0.198732	0.439478	0.270199	0.641277
79	Au	0.604740	0.505861	0.166139	0.378562	0.271793	0.640229
80	Hg	0.588859	0.518039	–	–	0.305180	0.658016
81	Tl	0.577165	0.526814	–	–	0.385788	0.746176
82	Pb	0.565460	0.534601	–	–	0.372989	0.732061

Коэффициенты  $A_I$  и  $\alpha_I$  в формуле  $I_{eff}$  (4.29) получим подгонкой методом наименьших квадратов к тормозной способности (3.9), вычисленной по теории Гризинского в [14] по диэлектрическому формализму Пауэла [38]. Надёжные расчеты по диэлектрическому формализму Пауэла [38] дают тормозные

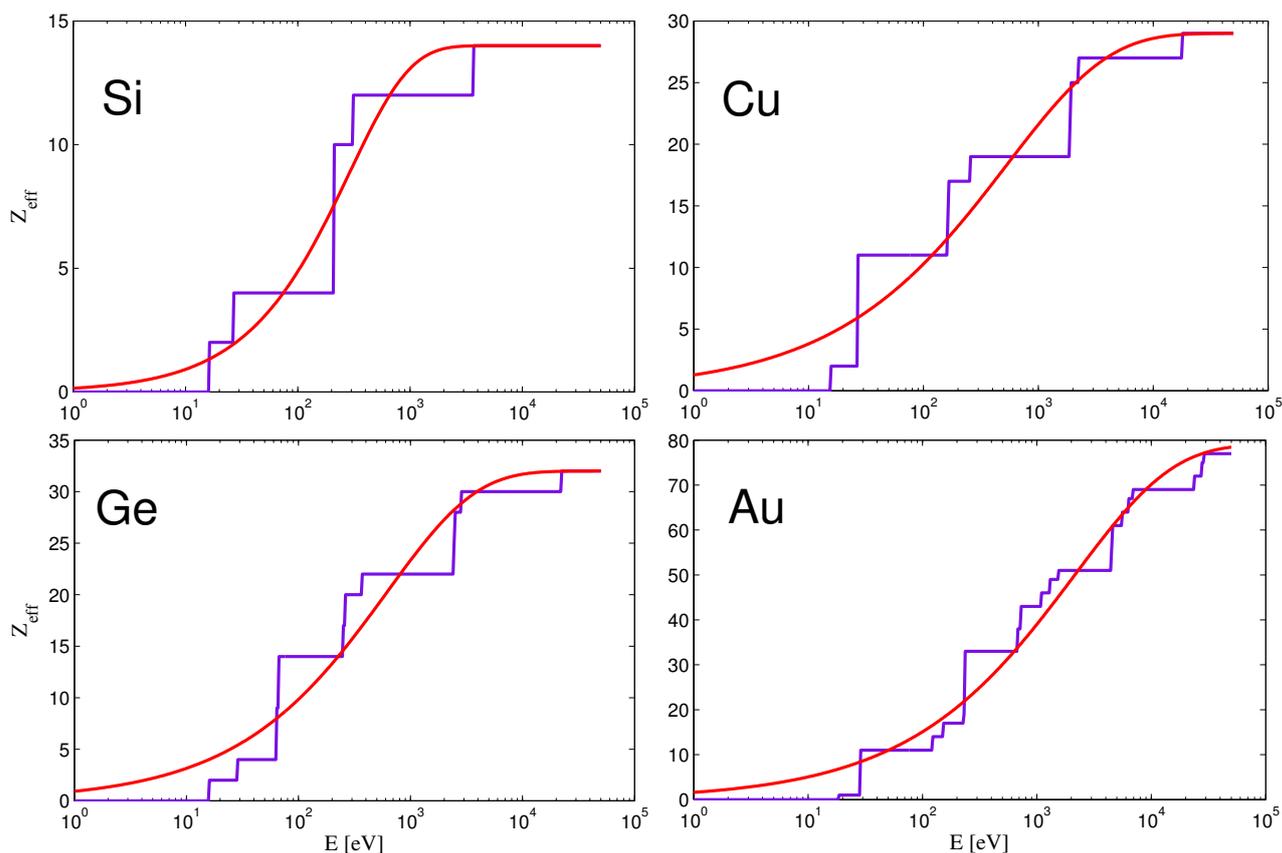


Рисунок 20 – Эффективное число электронов при ионизации атомов Si, Cu, Ge и Au электронами с энергией  $E$ : ступенчатые линии — по теории Гризинского, гладкие — по формуле (4.28)

способности всего 41 элементарных твердых веществ (Li, Be, графит, алмаз, стекловидное C, Na, Mg, Al, Si, K, Sc, Ti, V, Cr, Fe, Co, Ni, Cu, Ge, Y, Nb, Mo, Ru, Rh, Pd, Ag, In, Sn, Cs, Gd, Tb, Dy, Hf, Ta, W, Re, Os, Ir, Pt, Au, и Bi) при энергии от 50 эВ до 30 кэВ. В то время, работа [14], с учетом теории Гризинского, дает возможность вычисления неупругого рассеяния электронов на атомах для почти всех элементов на широком диапазоне энергии. В результате этого, она разрешает вычислить тормозные способности для почти всех веществ, если известны химическая формула и плотность молекул. В связи с этим обстоятельством, имеем подгоночные коэффициенты  $A_I$  и  $\alpha_I$  для 81 простых веществ (от  $Z = 1$  до  $Z = 82$ , кроме  $Z = 71$ ). Найденные коэффициенты приведены в таблице 4.

На рисунке 21 энергетические зависимости тормозных способностей, рас-

считанные для Si, Cu, Ge и Au, по теории Гризинского, по диэлектрическому формализму Пауэла [38] и по исходной формуле Бете сравниваются с тормозными способностями, вычисленными по модифицированной введенной эффективных  $Z_{eff}$  и  $I_{eff}$  формуле Бете. Результаты показывают, что в области энергии применения расчетов по данным [38], свыше 50 эВ, расчеты аппроксимации по данным [38] и по данным [14] хорошо согласуются. Отсюда можно сделать экстраполяцию, что для тех элементов, не поступающих в таблицу данных в работе [38], можем в полной мере применять данные по теории Гризинского [14] в аппроксимации формулы Бете.

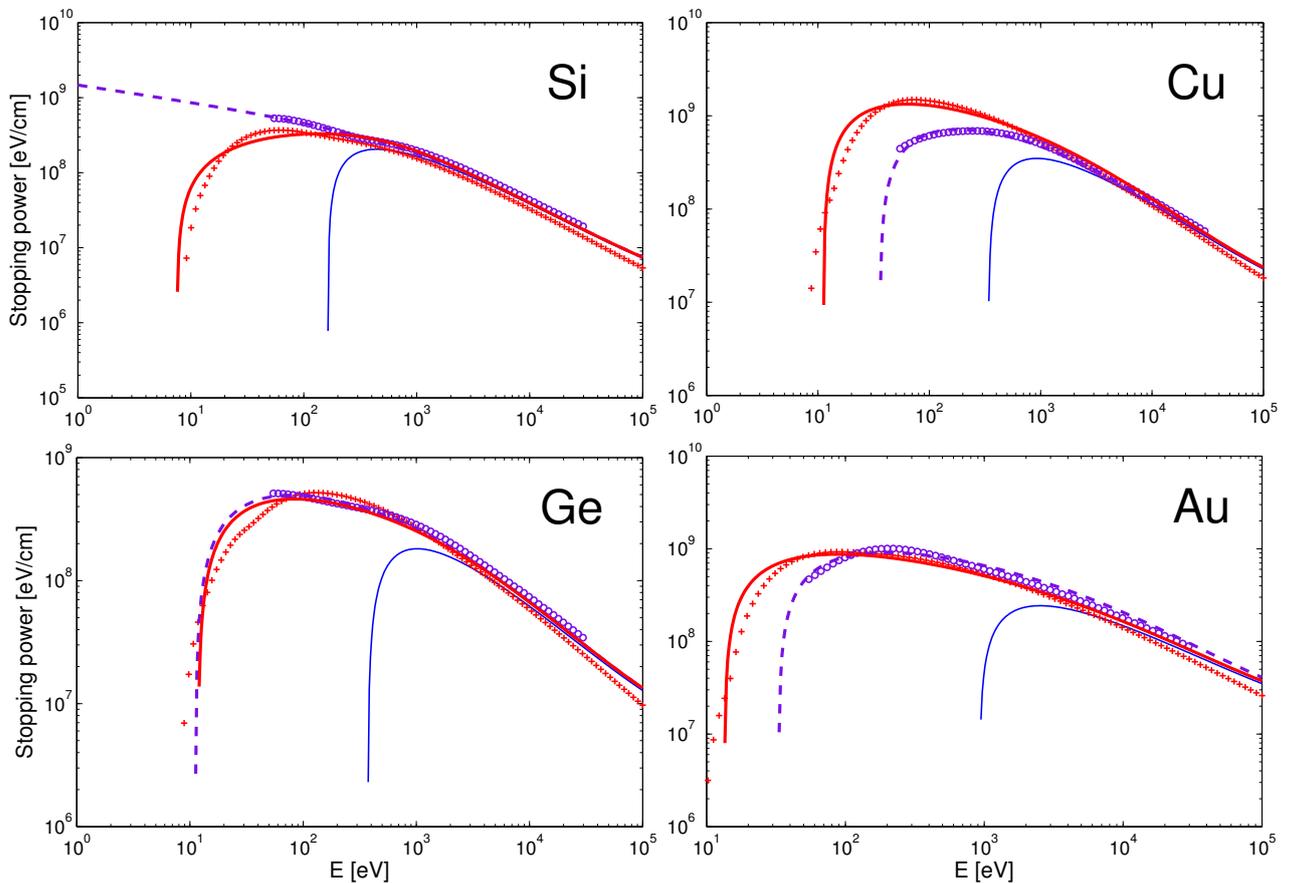


Рисунок 21 – Тормозные способности: тонкие сплошные линии — исходные формулы Бете, круглые точки — данные в [38], пунктирные линии — аппроксимационные к данным в [38], крестообразные точки — данные в [14], толстые сплошные линии — аппроксимационные к данным в [14]

## Выводы

Надёжные расчеты по диэлектрическому формализму Пауэла [38] дают тормозные способности всего 41 элементарных твердых веществ, в то время как применение теории Гризинского, дает возможность вычисления неупругого рассеяния электронов на атомах для всех элементов электронные конфигурации которых известны.

Таким образом, в данной работе предложен метод расчетов коэффициентов для эффективного атомного номера и эффективного среднего ионизационного потенциала в формуле Бете не ограниченный требованием наличия диэлектрических данных и приведены результаты вычислений для 82 элементов.

# Глава 5 Решение задач о прохождении электронов через вещество методом Монте–Карло

Алгоритм, представленный в Главе 1 диссертации, позволяет построить траектории электронов как с использованием приближения непрерывного замедления, так и при без него, если заданы начальная энергия электрона, первоначальное направление движения и энергия остановки. Анализ траекторий дает возможность исследовать проблемы, связанные с движением электронов в материалах методом Монте–Карло. Сравнивая результаты расчетов методом Монте–Карло с экспериментальными результатами, можно оценить правильность используемых сечений рассеяния и энергий ионизации электронов в атомах, обоснованность модифицированных формул, описанных в первой Главе, а также обоснованность алгоритмов построения траекторий, описанные во второй Главе.

В рамках настоящей диссертации, обратимся к изучению следующих задач:

- Вероятность выхода электронов из поверхности образцов
- Функция выхода при рентгено-электронной эмиссии.
- Коэффициент обратного рассеяния и энергетический спектр обратного рассеяния электронов

## 5.1 Вероятность выхода электронов из поверхности образцов

### 5.1.1 Модель и алгоритм

Рассмотрим образец материала в виде плоского полубесконечного тела. Поверхность образца соответствует плоскости  $z = 0$ . Функция  $q(z)$  представляет собой вероятность выхода из образца электрона, родившегося на расстоянии  $z$  от поверхности с определенной начальной энергией.

Чтобы найти зависимость функции  $q$  от переменной  $z$  по методу Монте-Карло, разделим образец на слои, имеющие одинаковую толщину  $dz$ , параллельные поверхности образца, как показано на рисунке 22. Слои должны быть достаточно тонкие, теоретически бесконечно тонкие, чтобы расстояния от любой точки одного и того же слоя до поверхности образца можно считать одинаковыми.

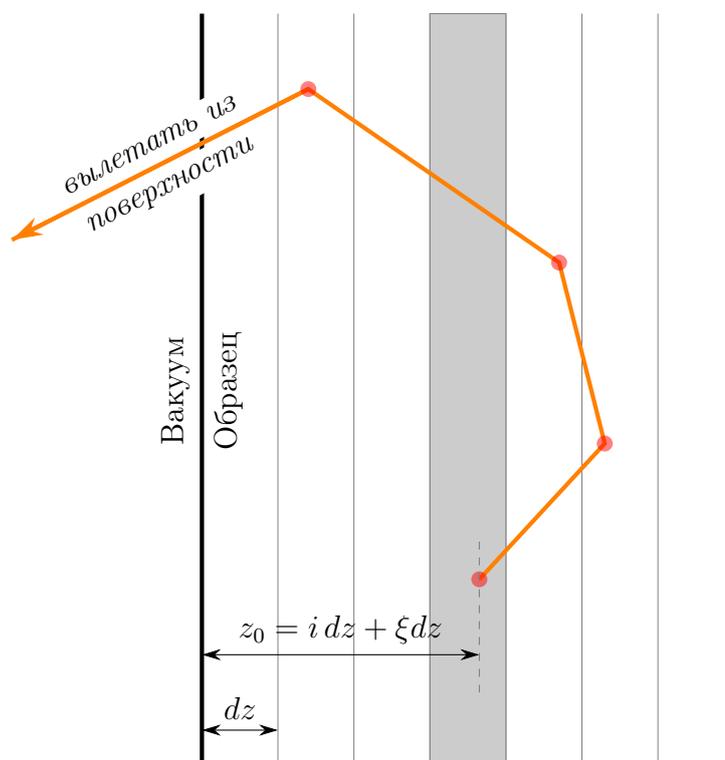


Рисунок 22 – Модель решения задачи функции выхода

Предположим, что надо найти вероятность выхода  $q(z_i)$  для  $i$ -ого слоя, расположенный на глубине  $z_i = i \cdot dz$  от поверхности. Будем моделировать

движение  $N$  электронов, рожденных изотропно в этом слое с заданной начальной энергией. Электронам присваиваются случайные первоначальные положения на оси  $z$  в диапазоне от  $i \cdot dz$  до  $(i + 1) \cdot dz$ :

$$z_0 = i dz + \xi dz,$$

где  $\xi$  — случайное число от 0 до 1. Остальные координаты  $x$  и  $y$  не играют важной роли в этой задаче, следовательно, можно присвоить им значение 0. Изотропность излучения электронов характеризуется случайностью начальных полярных и азимутальных углов:

$$\begin{aligned} \vartheta_0 &= \arccos(1 - 2\xi_1), \\ \varphi_0 &= 2\pi\xi_2, \end{aligned} \tag{5.1}$$

где  $\xi_1, \xi_2$  — случайные числа от 0 до 1.

Компьютерная программа подсчитывает количество  $N_i$  траекторий, преодолевших границы поверхности образца. Отношение этого количества к числу рождающихся электронов равно вероятности выхода для рассматриваемого слоя:

$$q(z_i) = \frac{N_i}{N}. \tag{5.2}$$

Когда  $N$  становится достаточно большим, отношение (5.2) становится стабильным и стремится к определенному значению.

### 5.1.2 Результаты

На рисунке 23 представлены примеры траекторий электронов рождающихся при ионизации  $e_L$  оболочки атомов германия фотонами с энергией 8.05 кэВ ( $\text{CuK}_\alpha$  линия рентгеновского излучения), которые изотропно испускаются из слоя на глубине  $1.5 \cdot 10^{-5}$  см от поверхности кристалла с начальной энергией 6.83 кэВ. При этом плоскость  $Oxy$  ( $z = 0$ ) совпадает с поверхностью кристалла.

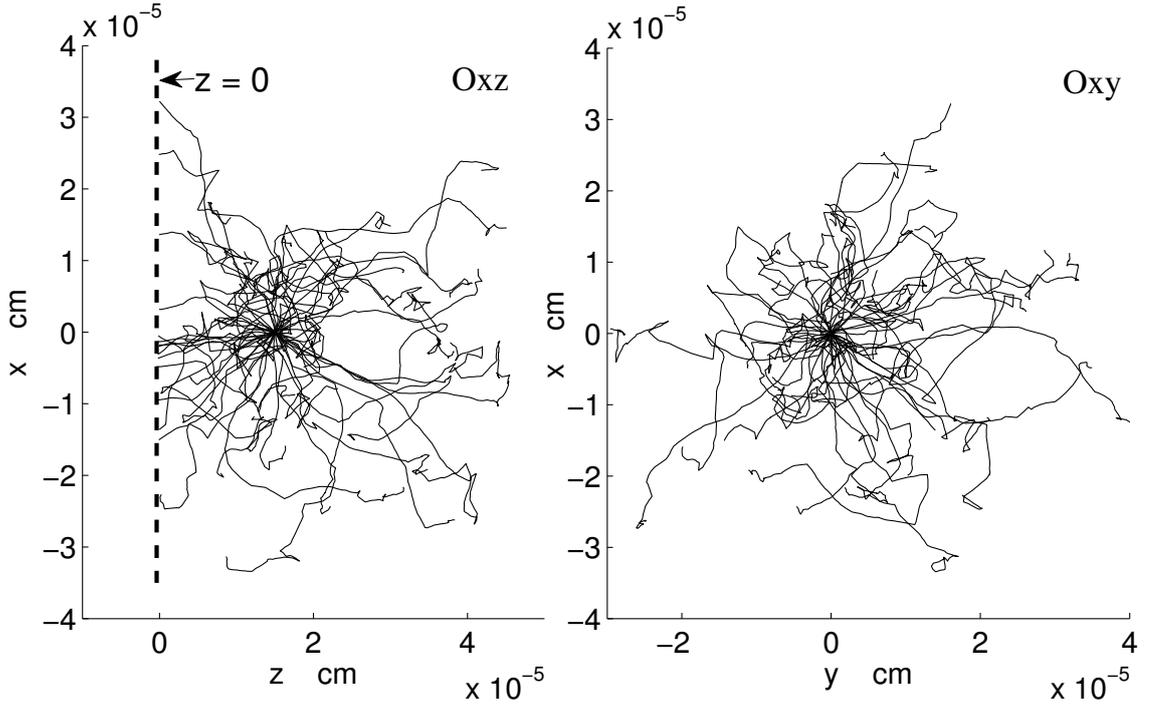


Рисунок 23 – Траекторий электронов, изотропно испускающих из глубины  $1.5 \cdot 10^{-5}$  см от поверхности кристалла германия

Зависимость функции  $q(z)$  от глубины  $z$  для германия с начальной энергией 6.83 кэВ, вычисленная методом Монте-Карло, показана на рисунке 24. Этот расчет соответствует группе электронов  $e_L$ , показанной в таблице 6. Сравним наш результат с вычислениями по диффузионной модели из работы [40]

$$q(z) = 1 - \operatorname{erf}\left(\frac{z}{L}\right), \quad (5.3)$$

и широко применяемой и эмпирической формулой

$$q(z) = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{z}{L^l}\right), \quad (5.4)$$

а также с более поздней работой тех же авторов [41], в которой приведены формулы для медленных электронов

$$q(z) = C_1 \exp\left(-\frac{z}{L_1}\right) \quad (5.5)$$

и для быстрых электронов.

$$q(z) = C_2 \left[1 - \operatorname{erf}\left(\frac{z}{L_2}\right)\right] \quad (5.6)$$

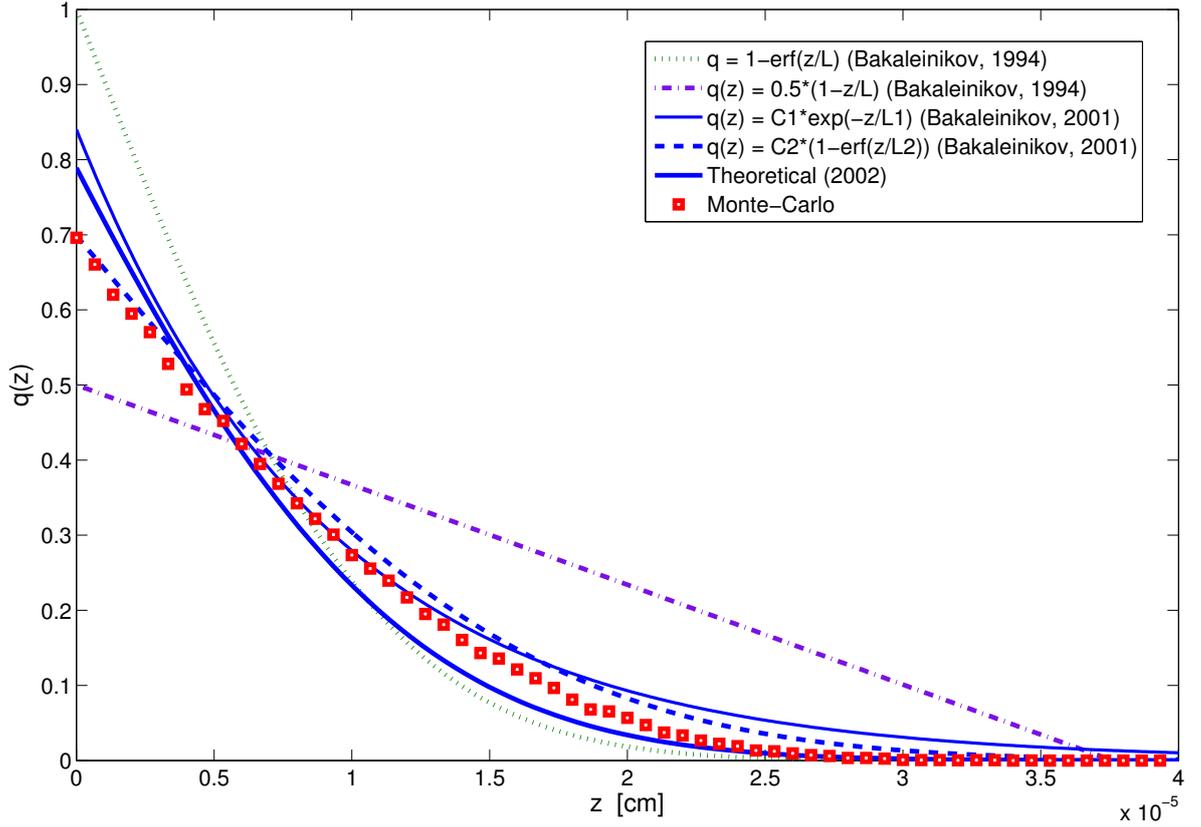


Рисунок 24 – Зависимость вероятности выхода от глубины рождения электронов для германия:  $\square$  — по Монте-Карло, остальные линии — формулы (5.3) – (5.7).

Здесь  $L$  в функции (5.3) и  $L^l$  в функции (5.4) представлены в таблицах 5 и 6. Параметры  $C_1$ ,  $L_1$  в функции (5.5) и  $C_2$ ,  $L_2$  в функции (5.6) получены в работе [41] путем подгонки диффузионной модели, той же, что и в работе [40], к результатам вычисления методом Монте-Карло.

В работе [42] получена функция выхода в  $P_1$  приближении метода разложения кинетического уравнения по сферическим функциям без введения в теорию эмпирических подгоночных параметров.  $P_1$  приближение также приводит к диффузионному приближению, но с иным уравнением и иным граничным условием, чем в работах [40, 41]. Полученная в [42] функция выхода имеет вид

$$q(z) = \operatorname{erf}\left(\frac{z}{2\sqrt{\tau}}\right) - \exp(a^2\tau + az) \operatorname{erfc}\left(a\sqrt{\tau} + \frac{z}{2\sqrt{\tau}}\right), \quad (5.7)$$

где  $a$  и  $\tau$  вычислены в [42].

Из рисунка 24 видно, что расчёты по Монте-Карло хорошо согласованы с функциями (5.5) и (5.6).

Таблица 5 – Характеристики вышедших электронов для кремния

Электроны	Энергия, кэВ	Вероятность рождения	$L$ , см	$L^l$ , см
$e_K$	6.2	0.92	$2.2 \cdot 10^{-5}$	$6.65 \cdot 10^{-5}$
$e_L$	7.9	0.08	$3.4 \cdot 10^{-5}$	$9.33 \cdot 10^{-5}$
$e_{KLL}$	1.6	0.88	$2.3 \cdot 10^{-7}$	$2.3 \cdot 10^{-6}$

Таблица 6 – Характеристики вышедших электронов для германия

Электроны	Энергия, кэВ	Вероятность рождения	$L$ , см	$L^l$ , см
$e_L$	6.83	0.88	$1.2 \cdot 10^{-5}$	$3.76 \cdot 10^{-5}$
$e_M$	7.9	0.12	$1.5 \cdot 10^{-5}$	$4.6 \cdot 10^{-5}$
$e_{LMM}$	1.16	0.86	$8.4 \cdot 10^{-7}$	$3.1 \cdot 10^{-6}$

## 5.2 Интегральная функция выхода для электронов

### 5.2.1 Модель и алгоритм

Интегральная функция выхода  $K(z)$  определяется отношением количества электронов, вышедших из пленки толщиной  $z$  с энергией большей верхней границы вторичных электронов - 50 эВ, к полному количеству вышедших электронов

$$K(z) = \frac{\int_0^z q(z) dz}{\int_0^\infty q(z) dz}. \quad (5.8)$$

Видно, что определение функции  $K(z)$  связано с определением функции вероятности выхода  $q(z)$ . Другими словами, если функция  $q(z)$  известна, то функция  $K(z)$  сразу получается интегрированием. Задача нахождения функции  $K(z)$  приводится к задаче нахождения функции  $q(z)$ , рассматриваемой в предыдущем пункте. Следовательно, алгоритм для задачи функции выхода  $K(z)$  повторяет алгоритм для предыдущей проблемы и не нуждается в повторном описании.

Предположим, что функция  $q(z)$  рассчитана по Монте–Карло для каждого слоя и образован массив:

$$q(z_1), \quad q(z_2), \quad q(z_3), \quad \dots \quad q(z_i), \quad \dots \quad q(z_{n-1}), \quad q(z_n),$$

где  $n$  — число рассматриваемых слоев.

Интеграл в знаменателе формулы (5.8) вычисляется суммой

$$\int_0^\infty q(z) dz = [q(z_1) + q(z_2) + \dots + q(z_n)] dz = \sum_{i=1}^n q(z_i) dz. \quad (5.9)$$

Здесь необходимо выбрать  $z_n$  достаточно глубоко так, чтобы значение функции  $q(z)$  стремилось к нулю:  $q(z_n) \rightarrow 0$ . Это обстоятельство гарантирует, что интеграл (5.9) стабилен и не зависит от выбранной максимальной глубины  $z_n$ .

Интеграл в числите формулы (5.8) для каждого слоя вычисляется по следующей схеме:

$$\begin{aligned}
 \int_0^{z_1} q(z) dz &= q(z_1) dz, \\
 \int_0^{z_2} q(z) dz &= [q(z_1) + q(z_2)] dz, \\
 &\dots \\
 \int_0^{z_i} q(z) dz &= [q(z_1) + q(z_2) + \dots + q(z_i)] dz, \\
 \int_0^{z_n} q(z) dz &= [q(z_1) + q(z_2) + \dots + q(z_n)] dz.
 \end{aligned} \tag{5.10}$$

Перепишем в компактном виде:

$$\int_0^{z_i} q(z) dz = \sum_{i=1}^i q(z_i) dz. \tag{5.11}$$

Из (5.8), (5.9) и (5.11) можно выразить значение функции выхода  $K(z)$  для  $i$ -ого слоя :

$$K(z_i) = \frac{\sum_{i=1}^i q(z_i) dz}{\sum_{i=1}^n q(z_i) dz} = \frac{\sum_{i=1}^i q(z_i)}{\sum_{i=1}^n q(z_i)}. \tag{5.12}$$

### 5.2.2 Сравнение с экспериментальными данными

Экспериментальное определение функции выхода для образцов кремния и германия, обучаемых характеристическим рентгеновским излучением  $\text{CuK}_\alpha$  (энергия рентгеновских фотонов 8.05 кэВ), было выполнено в работе [43]. Характеристики электронов, возникающих в результате фотоионизации, представлены в таблицах 5 и 6 [40].

Результаты расчетов методом Монте-Карло функций выхода  $K(z)$  для двух групп электронов  $e_K$  (6.2 кэВ) и  $e_L$  (7.9 кэВ) атомов Si с учетом вероятностей рождения соответственно 0.92 и 0.08 показаны на рисунке 25(а). При этом использовано запирающее напряжение 1.9 кВ, вклад в квантовый выход вносят лишь электроны 1-ой и 2-ой групп. При запирающем напряжении

50 эВ вклад в квантовый выход вносят все группы  $e_K$ ,  $e_L$  и  $e_{KLL}$  с вероятностями 0.92, 0.08 и 0.86 соответственно, как показано на рисунке 25(b). Из этой рисунки можно сравнивать наш результат с расчетами по формуле (5.12), при котором выражение  $q(z)$  имеет различные виды.

Результаты расчетов методом Монте-Карло функций  $K(z)$  для Ge с характеристиками, вложенными в таблице 6 показаны на рисунке 26.

Видно, что расчеты по Монте-Карло лучше согласованы с функцией выхода, вычисленной по функции (5.7), чем с функцией выхода, вычисленной по функции (5.3) и (5.4). Особенно для Si, расчеты по Монте-Карло лучше всех согласованы с экспериментальными результатами.

### 5.3 Коэффициент обратного рассеяния и энергетический спектр обратного рассеяния электронов

#### 5.3.1 Модель и алгоритм

Явление обратного рассеяния электронов представляет большой теоретический и практический интерес. Коэффициент обратного рассеяния  $\delta$ , показывающий какую часть электронов падающего пучка в результате процессов упругого и неупругого рассеяния выходит обратно из мишени, и его зависимость от энергии  $E$ , атомного номера и других параметров даёт определённую информацию о механизме рассеяния и торможения электронов в веществе. Эта информация играет важную роль в исследовании вторичной электронной эмиссии, в рентгеноспектральном микроанализе, в растровой электронной микроскопии. В расчётах методом Монте-Карло проявляется высокая чувствительность коэффициента обратного рассеяния электронов  $\delta$  и их энергетических спектров от формы выбираемых выражений для сечений упругого и неупругого рассеяний. Таким образом, эти характеристики позволяют дать более строгую оценку правильности и точности различных

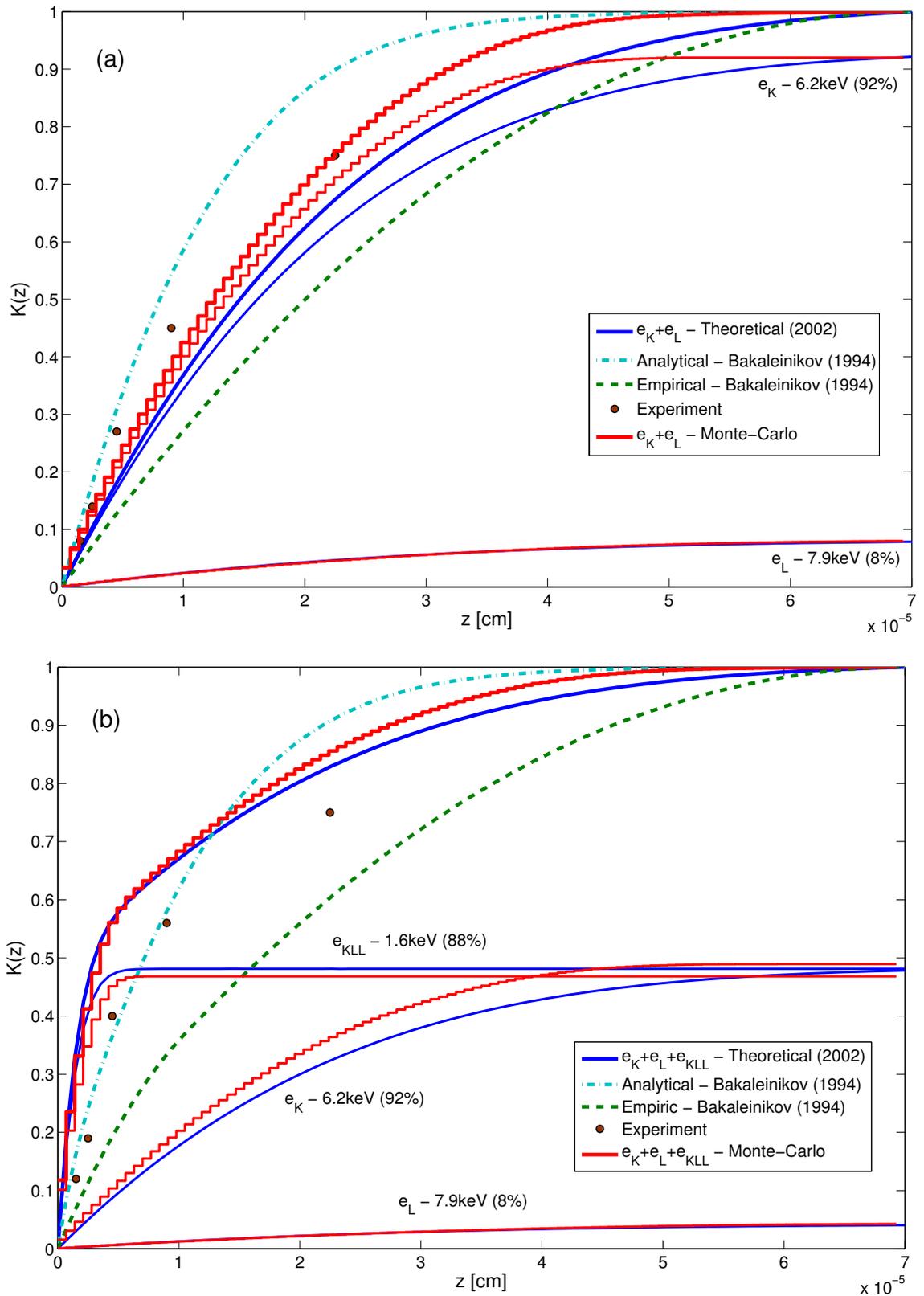


Рисунок 25 – Зависимость доли  $K(z)$  электронов, вышедших из слоя, от толщины слоя  $z$  для кремния, облучаемого  $CuK_\alpha$ -линией: (а) – при запирающем напряжении 1.9 кэВ, (б) – при запирающем напряжении 0.05 кэВ

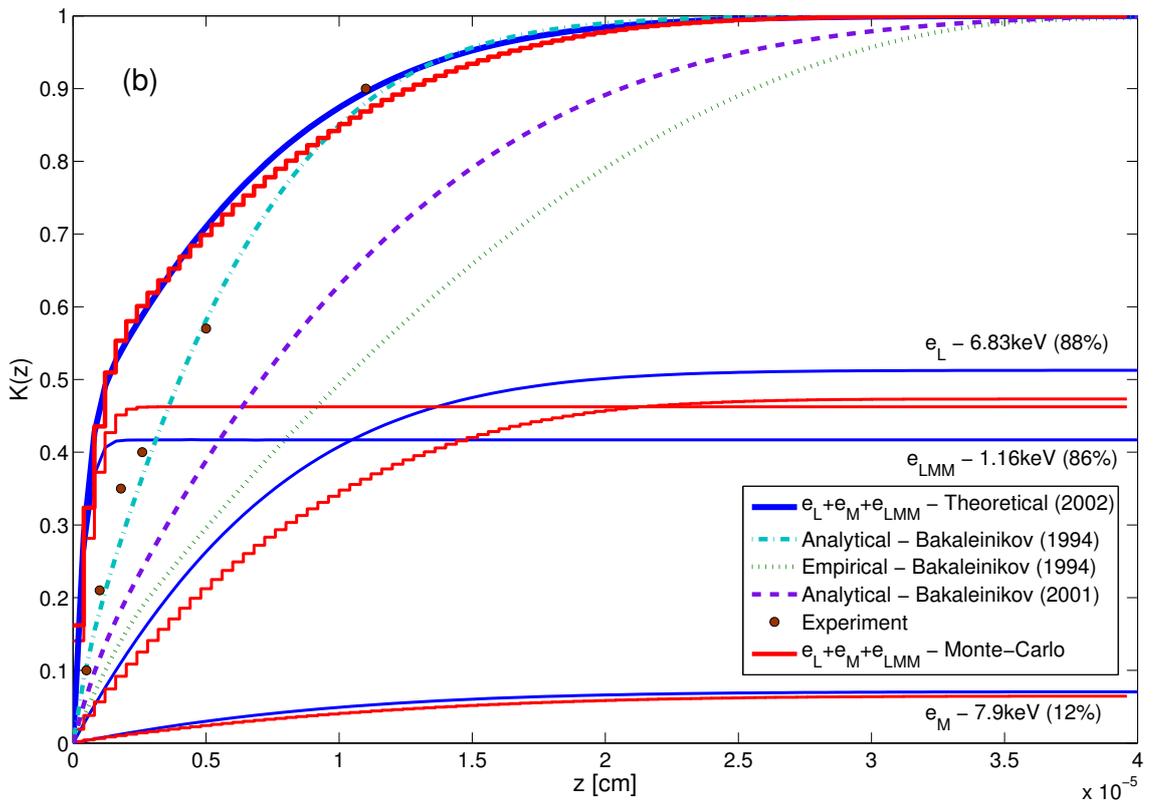
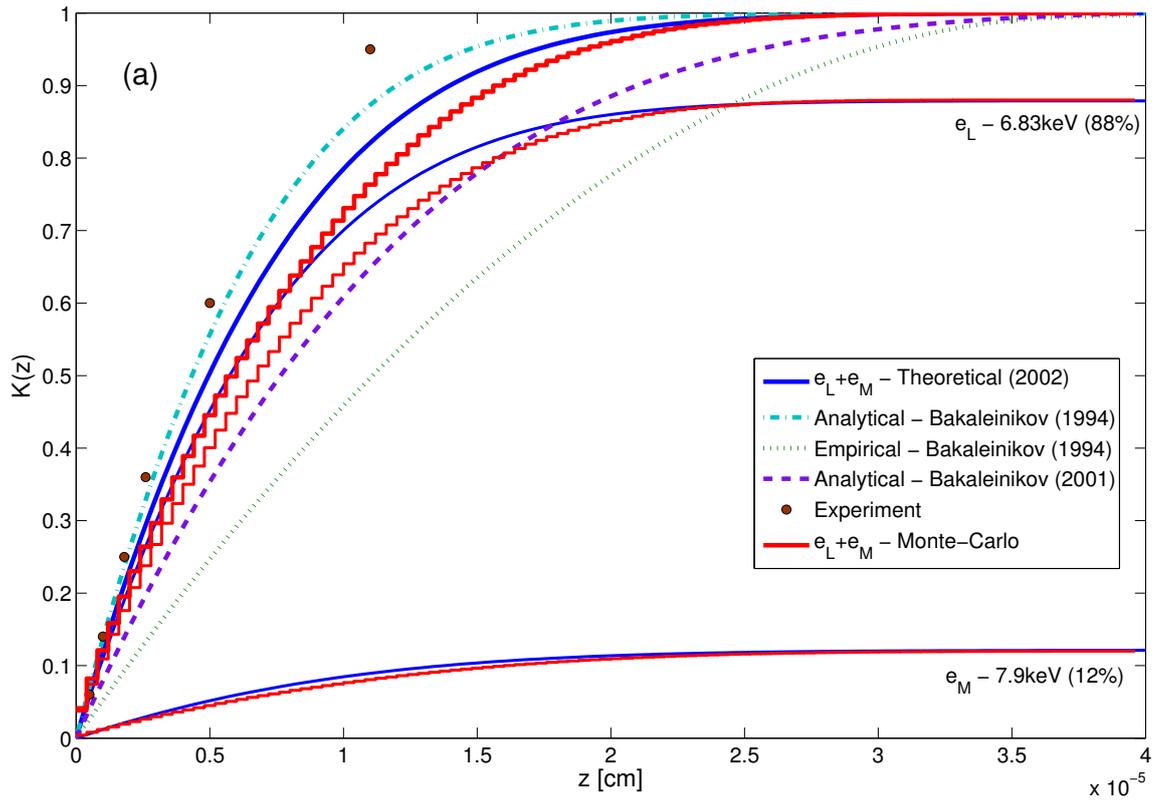


Рисунок 26 – Зависимость доли  $K(z)$  электронов, вышедших из слоя, от толщины слоя  $z$  для германия, облучаемого  $CuK_\alpha$ -линией: (a) — при запирающем напряжении 1.3 кэВ, (b) — при запирающем напряжении 0.05 кэВ

схем моделирования методом Монте–Карло.

Для выяснения статистических закономерностей обратного рассеяния найдём коэффициент обратного рассеяния и энергетический спектр обратного рассеяния. Рисунок 27 описывает моделирование 100 траекторий электронов с начальной энергией 10 кэВ, перпендикулярно падающих на поверхность образца алюминия.

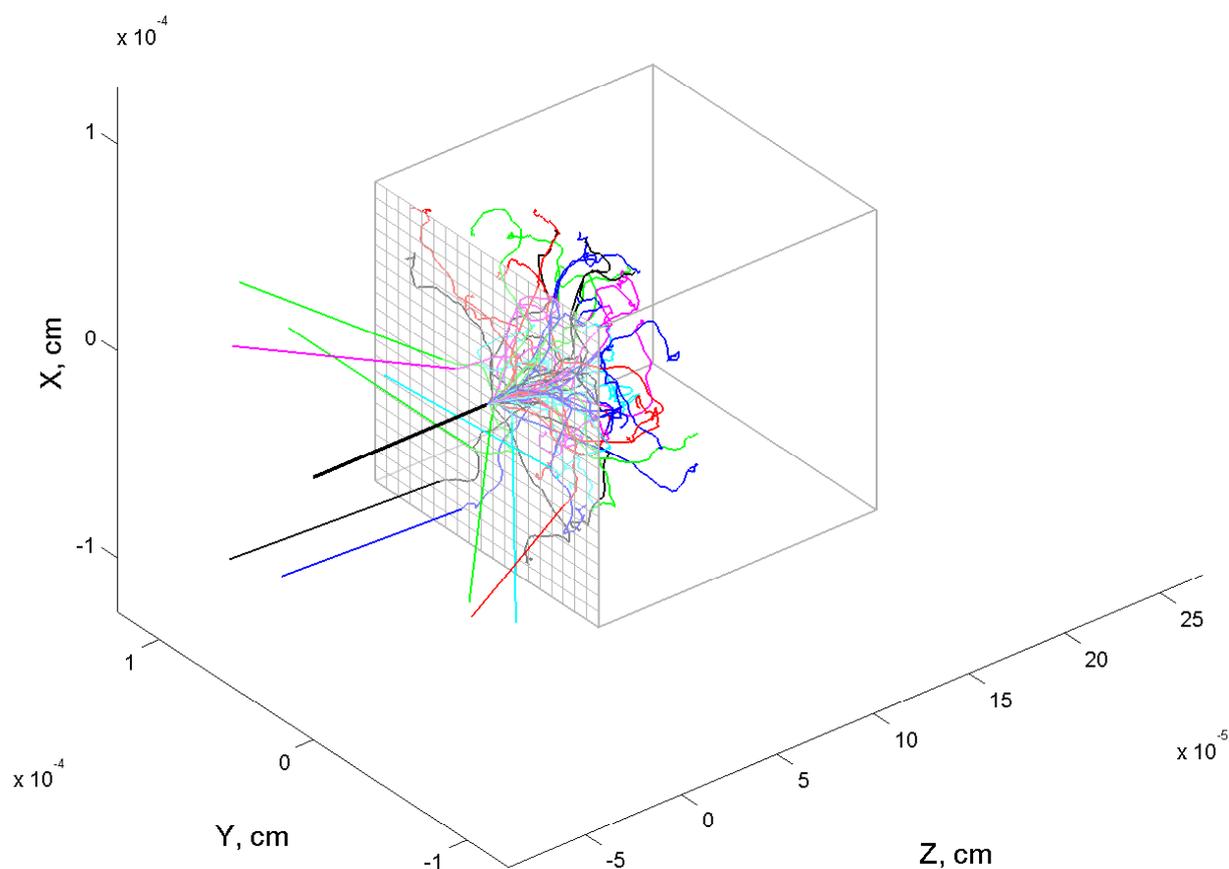


Рисунок 27 – Модель решения задачи обратного рассеяния

Пусть перпендикулярно к поверхности образцов падает  $N$  электронов, имеющих энергию  $E_0$ . Надо ответить на два вопроса: - вылетает ли электрон обратно в свободное пространство и - если вылетает, то какую энергию он имеет.

Отношение числа  $N_b$  обратно рассеянных электронов к суммарному числу  $N$  падающих дает коэффициент обратного рассеяния:

$$\delta = \frac{N_b}{N}. \quad (5.13)$$

Алгоритм для получения статистической функции энергетического распределения осуществляется следующим образом. Энергия электрона, вылетающего через поверхность образца, может находиться в области  $E \in [0, E_0]$ . Разделим эту область энергии на  $n_E$  на равных малых интервалов  $\delta E = E_0/n_E$ . Компьютерная программа работает с массивом

$$db = [db(1), db(2), \dots, db(i), \dots, db(n_E)],$$

в котором сохраняются число обратно рассеянных электронов в данном интервале энергий. Когда некоторый электрон вылетает из образца с энергией  $E$ , к  $i$ -му элементу массива  $b$  добавляется единица:

$$i = [E/\delta E] + 1 \quad \text{и} \quad db(i) \equiv db(i) + 1, \quad (5.14)$$

где  $[E/\delta E]$  – целая часть числа.

Вероятность того, что обратно рассеянный электрон имеет энергию, лежащую в  $i$ -ом интервале, дается выражением

$$d\delta(i) = \frac{db(i)}{N}. \quad (5.15)$$

Найдем энергетический спектр обратного рассеяния:

$$\frac{d\delta}{dE}(i) = \frac{db(i)}{NdE} = \frac{db(i)n_E}{NE_0}. \quad (5.16)$$

Аргумент энергии этой функции часто рассматривается в единице начальной энергии  $W = E/E_0$ , следовательно

$$\frac{d\delta}{dW}(i) = \frac{db(i)n_E}{N}. \quad (5.17)$$

Нетрудно проверить, что распределение обратно рассеянных электронов по энергии выполняется условие нормировки:

$$\sum_{i=0}^{n_E} \frac{d\delta}{dW}(i) \cdot dW = \delta, \quad (5.18)$$

где  $\delta$  — коэффициент обратного рассеяния.

### 5.3.2 Сравнение с экспериментальными данными

Результаты расчетов коэффициентов обратного рассеяния для Be, Al, Cu и Au представлены на рисунке 28. Используемый здесь метод Монте-Карло является моделью непрерывного замедления, где тормозные способности  $dE/ds$  дается формулой Бете, которая модифицируется по теории Гризинского. В случае упругого рассеяния используем непосредственно формулу Резерфорда-Бете (2.7) с коэффициентами экранирования, взятыми из (2.8). Видно, что зависимости коэффициентов обратного рассеяния от энергии падающих электронов, соответствующие с Be, Al и Cu (тонкие линии), хорошо согласуются с экспериментами, а в графике для Au возникает большое расхождение и согласуется с экспериментами только при высоких энергиях, свыше 30–40 кэВ. Тем не менее, с помощью модифицирования по данным упругого рассеяния по более точному исследованию Мотта, модифицированная формула Резерфорда–Мотта становится надежной, и рассчитанные по Монте-Карло коэффициенты обратного рассеяния (толстая линия) уже хорошо согласуются с экспериментами.

Для объяснения этого явления, обратим внимание на таблицу 2 энергий связи электронов в атомах. Энергия ионизации  $K$ -оболочки атомов Be равна 123.6 эВ. В случае атомов Al это значение равняется 1567 эВ. Наш диапазон исследования простирается от 500 эВ до 100 кэВ. Эти энергии падающих электронов во много раз превышают энергию связи, эффект экранирования становится слабым. Поэтому в этом случае может быть применима классиче-

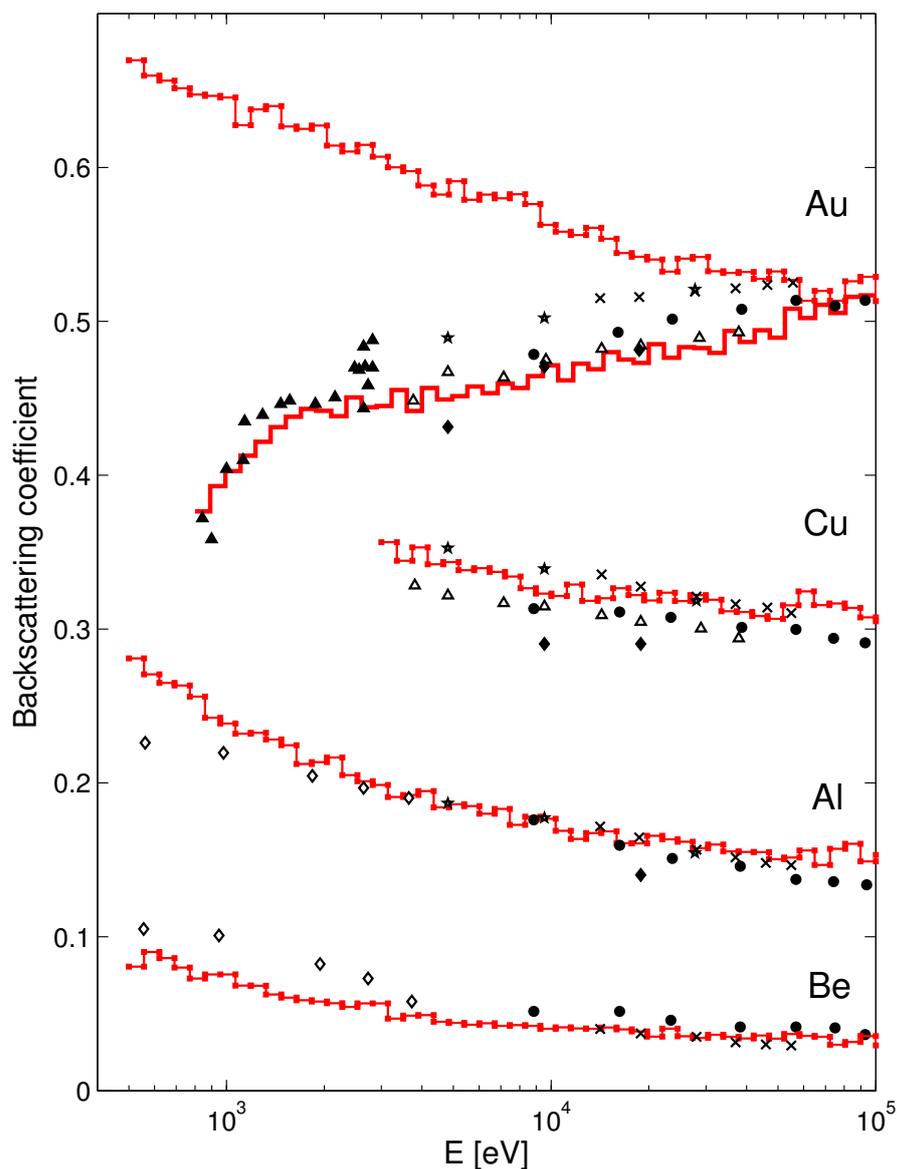


Рисунок 28 – Зависимости коэффициентов обратного рассеяния от энергии для Be, Al, Cu и Au: тонкие гистограммы — по Монте-Карло с использованием оригинальной формулы Резерфорда-Бете, толстая гистограмма — по Монте-Карло с использованием модифицированной по Мотту формулы Резерфорда-Бете, символы — экспериментальные данные, собранные в [44].

ская формула Резерфорда-Бете (2.7). Для Cu энергия ионизации  $K$ -оболочки равна 8986 эВ, наши расчет методом Монте-Карло также относится к области энергий выше этого значения, так как экспериментальные данные при более низких энергий отсутствуют. Поэтому оригинальная формула Резерфорда-Бете все еще хорошо работает. Если бы существовали экспериментальные

данные в низкой области энергии, может быть расхождение между расчетом и экспериментом было заметным.

Рассмотрим случай золота. Энергия ионизации  $K$ -оболочки атомов золота приблизительно 80 кэВ. Исследуемые падающие электроны, имеющие энергии меньше 100 кэВ, испытывают в сильное влияние эффекта экранирования атомных электронов. При этом сечение рассеяния, вычисленное по оригинальной формуле Резерфорда, уже непригодно. Нам нужно более подходящие сечение, а именно сечение упругого рассеяния по Мотту.

Существуют некоторые теоретические модели, предложенные разными авторами для объяснения механизма обратного рассеяния.

В работе [45] величина коэффициента обратного рассеяния определяется выражением

$$\delta = \frac{7Z - 80}{14Z - 80}. \quad (5.19)$$

В работе [46] коэффициент обратного рассеяния дается выражением

$$\delta = \frac{Z(1 - \ln 2)}{8C}, \quad (5.20)$$

где

$$C = 2 \ln \frac{2E}{I},$$

$E$  — энергия падающих электронов,  $I$  — средний ионизационный потенциал атома.

В работе [47] решение задачи обратного рассеяния приводит к следующей формуле:

$$\delta = \frac{1}{2}(1 - \cos \theta_0). \quad (5.21)$$

Здесь

$$\cos \theta_0 = \frac{1 + 2p + 0.21p^2}{2(1 + p)^2 + 0.21p^2 - 2p - 1},$$

где  $p = 0.187Z^{2/3}$ .

Кроме того, коэффициенты обратного рассеяния могут быть получены интегрированием эмпирической функции энергетического спектра обратного рассеяния (5.22).

Заметим, что среди приведенных выше аналитических формул существуют выражения для  $b$ , не зависящие от энергии. Из рисунка 28 видно, что при больших энергиях коэффициенты обратного рассеяния изменяются медленно, график для каждого элемента представляется почти горизонтальной прямой. Поэтому обстоятельство, что аналитические выражения не содержат энергию, представляется разумным. На рисунке 29 представлены зависимости коэффициентов обратного рассеяния от атомного номера, вычисленные по аналитическим выражениям (5.19–5.22) и по Монте-Карло. Для расчетов по методу Монте-Карло и выражениям, содержащим энергию, возьмем  $E = 30$  кэВ. Экспериментальные данные, хотя со значительным разбросом, так как они взяты из разных источников, выглядят согласованными с расчетом по Монте-Карло выполненными в настоящей работе.

На рисунке 30 сравниваются энергетические спектры обратного рассеяния настоящей работы с экспериментом. Вопросу расчёта энергетического спектра обратного рассеяния электронов посвящена работа [48]. В работе [48] изложен эмпирический метод расчёта энергетического спектра обратного рассеяния:

$$\frac{d\delta}{dW} = \left(\frac{g}{2}\right)^p \frac{p}{r} W^{1/r-1} \left(1 - W^{1/r}\right)^{p-1} \exp \left\{ - \left[ g \left(1 - W^{1/r}\right) \right]^p \right\}, \quad (5.22)$$

где

$$\begin{aligned} W &= E/E_0, \\ r &= 2.72Z^{-0.4}, \\ g &= 1 + 0.34Z^{0.4}, \\ p &= \frac{3.8\sqrt{Z/A}}{\lg Z}. \end{aligned}$$

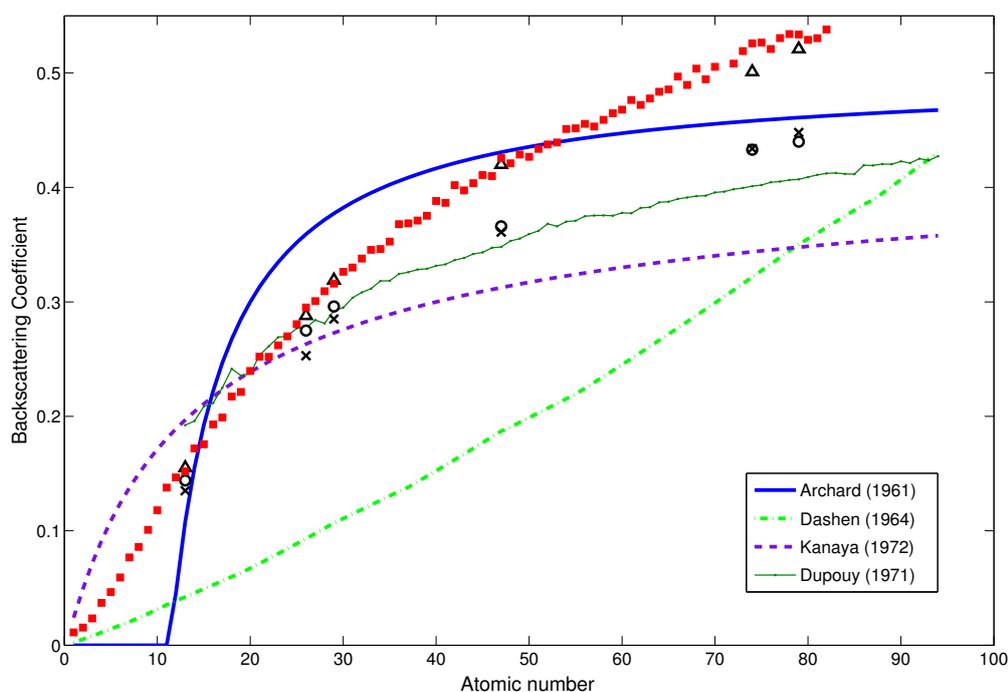


Рисунок 29 – Зависимости коэффициентов обратного рассеяния от атомного номера: квадрат — результат настоящей работы по Монте–Карло, символы — экспериментальные данные, собранные в [48].

$Z$  — атомный номер,  $A$  — атомная масса. На рисунке 30 расчеты по выражению (5.22) выражаются гладкими пунктирными линиями. Нас интересует только энергетический спектр, поэтому применена нормировка спектра по величине коэффициента обратного рассеяния. Видно, что для элементов с малыми атомными номерами энергетические спектры настоящей работы лучше согласуются с экспериментом, чем при больших атомных номерах.

На рисунке 31 представлены зависимости коэффициентов обратного рассеяния от атомного номера при разных углах падения первичного потока электронов с энергией 100 кэВ: перпендикулярно к поверхности образца и под углом 60 градусов к нормали. Результаты сопоставлены с экспериментальными данными, а также с расчетом по программе PENELOPE [44] и, очевидно, хорошо согласуются с экспериментом.

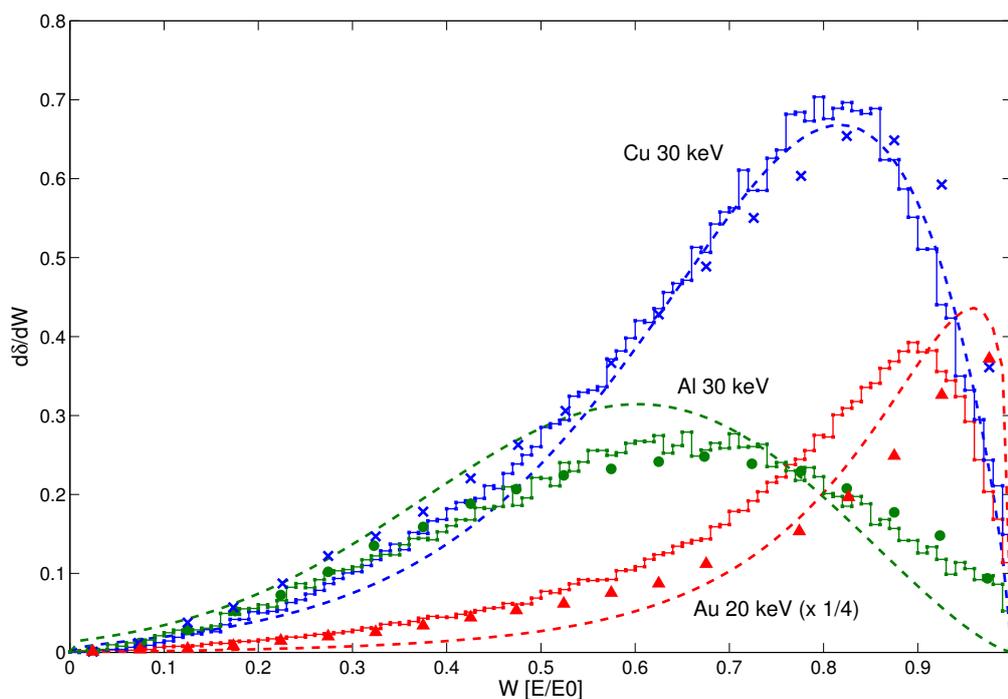


Рисунок 30 – Энергетические спектры обратного рассеяния для Al, Cu и Au при соответственных энергий падающих электронов: гистограммы — результаты настоящей работы, гладкие линии — по формуле (5.22), символы — экспериментальные данные, собранные в [44].

## Выводы по главе

Таким образом, вычисления методом Монте-Карло с использованием дифференциального сечения упругого рассеяния по Мотту и дифференциального сечения неупругого рассеяния по теории Гризинского дают хороший подход, позволяющий решать некоторые задачи о прохождении электронов через вещество и оценивать аналитические подходы. С другой стороны, согласование результатов расчетов методом Монте-Карло с экспериментом доказывают, что этот метод пригоден для замены экспериментов при тестировании надежности теоретических выводов.

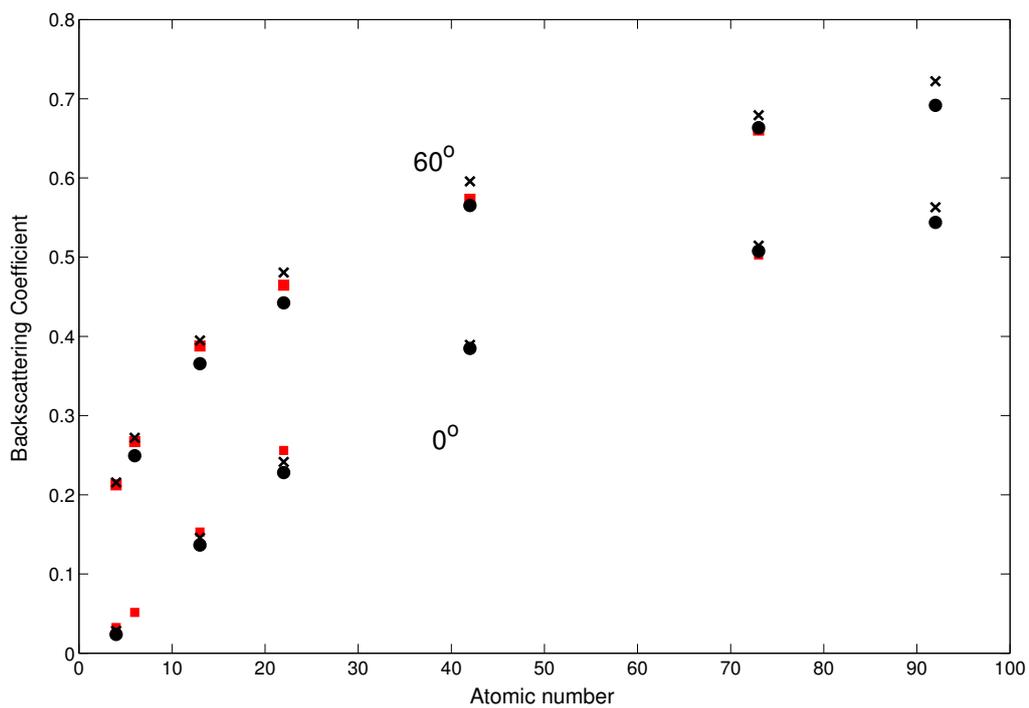


Рисунок 31 – Зависимости коэффициентов обратного рассеяния от атомного номера при разных углах падения потока электронов с энергией 100 кэВ: квадрат — результат настоящей работы, крест — расчет на программе PENELOPE [44], круглые символы — экспериментальные данные [49].

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В диссертации получены следующие результаты, характеризующиеся научной новизной:

1. Предложена модифицированная формула Резерфорда–Мотта, для вычисления упругого столкновения электронов с атомами, понижающая нижний предел применимости исходной формулы Резерфорда–Бете с нескольких кэВ до единиц эВ.
2. Вычислены детальные характеристики неупругого рассеяния падающего электрона на электронах атомных оболочек в конденсированном веществе при энергиях падающего электрона от 10 эВ до 100 кэВ по квантово-механической теории Гризинского.
3. Предложена модифицированная формула тормозной способности Бете–Блоха, на основе аппроксимация данных, вычисленных по теории Гризинского, и пригодная для веществ любого химического состава.
4. Предложен новый алгоритм Монте-Карло для моделирования столкновений электрона с атомами в конденсированном веществе, основанный на применении аналитической формулы Резерфорда–Мотта и на детальных характеристиках неупругого рассеяния на оболочках атома, вычисленных по теории Гризинского.
5. На основе результатов, перечисленных в пп.1-4, решен ряд задач о прохождении электронов через вещество: задачи о вероятности выхода, функции выхода, коэффициенте обратного рассеяния, энергетическом спектре обратного рассеяния, разбросе электронов по пройденному пути и по потерянной энергии и получены следующие результаты:

- показано, что предложенный алгоритм в отличие от экспериментов, позволяет выделить вклад в интегральную функцию выхода каждой из групп рождаемых при рентгеноэлектронной эмиссии электронов;
- показано, что вычисленные коэффициенты обратного рассеяния энергетические спектры согласуются с экспериментальными данными в широком интервале атомных номеров веществ и углов падения;
- показано, что страгглинг пробегов и энергий электронов существенно влияет на прохождение электронов в веществе.

Таким образом, показано, что предложенный быстро работающий алгоритм метода Монте-Карло, основанный на применении аналитических аппроксимаций вероятностей упругого рассеяния по Резерфорду-Мотту и неупругого рассеяния по Гризинскому, является эффективным средством общезфизических исследований в эмиссионной электронике.

# СПИСОК ИСПОЛЬЗУЕМЫХ ИСТОЧНИКОВ

- [1] Mott N. F. The scattering of fast electrons by atomic nuclei //Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character. – 1929. – Т. 124. – №. 794. – С. 425-442.
- [2] Jablonski A., Salvat F., Powell C. J. Comparison of electron elastic-scattering cross sections calculated from two commonly used atomic potentials //Journal of physical and chemical reference data. – 2004. – Т. 33. – №. 2. – С. 409-451.
- [3] Salvat F., Jablonski A., Powell C. J. ELSEPA—Dirac partial-wave calculation of elastic scattering of electrons and positrons by atoms, positive ions and molecules //Computer physics communications. – 2005. – Т. 165. – №. 2. – С. 157-190.
- [4] Jablonski A. NIST electron elastic-scattering cross-section database : дис. – National Institute of Standards and Technology, 2010.
- [5] Смоляр, В. А. Упругое рассеяние электронов в твёрдых телах / В. А. Смоляр, Чьонг Тхань Хиеу Нгуен // Изв. ВолгГТУ. Серия «Электроника, измерительная техника, радиотехника и связь». Вып. 5: межвуз сб. науч. ст. / ВолгГТУ. – Волгоград, 2011. - № 6. С. 11 – 16.
- [6] Salvat F., Fernandes-Varea J.M., Sempau J. // Workshop Proc. Barcelona, Spain, 4–7 June 2006, OECD 2006, NEA N 6222.
- [7] Bethe, H. A. Hand.d.Physik / H. A. Bethe. — Berlin, 1933. — Vol.4.
- [8] Gryzinsky, M. Two-particle collisions. II. Coulomb collisions in the laboratory system of coordinates / M. Gryzinsky // Phys. Rev. – 1965. – V. 138. - № 2A. – P. 322 - 335.

- [9] Ashley, J. C. Energy loss rate and inelastic mean free path of low-energy electrons and positrons in condensed matter / J. C. Ashley // Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena. – 1990. – V. 50. – P. 323 - 334.
- [10] Palik, E. D. Handbook of Optical Constants of Solids / E. D. Palik. – New York, – 1985.
- [11] NIST [Электронный архив] – Режим доступа: <http://www.nist.gov/pml/data/index.cfm>
- [12] Смоляр В. А. и др. Аналитические аппроксимации сечений упругого рассеяния электронов на атомах // Известия Волгоградского государственного технического университета. – 2013. – Т. 8. – №. 23 (126).
- [13] Смоляр, В. А. Моделирование траекторий электронов в веществе с учётом вторичных электронов и оже-электронов методом Монте-Карло / В.А. Смоляр, Хай Кат Чан // Известия ВолгГТУ. Серия «Электроника, измерительная техника, радиотехника и связь». Вып. 8 : межвуз. сб. науч. ст. / ВолгГТУ. - Волгоград, 2013. - № 23 (126). - С. 21-27.
- [14] Смоляр, В. А. Вычисление неупругого рассеяния электронов в твёрдых телах по теории Гризинского и по экспериментально измеренной диэлектрической функции / В. А. Смоляр, Чан Хай Кат // Известия ВолгГТУ. Серия «электроника, измерительная техника, радиотехника и связь». – Волгоград, 2012. – № 6. – С. 15 – 21.
- [15] Смоляр, В. А. Аналитическая формула тормозной способности Бете с эффективным атомным номером и эффективным ионизационным потенциалом / В.А. Смоляр, Хай Кат Чан // Известия ВолгГТУ. Сер. Электро-

ника, измерительная техника, радиотехника и связь. Вып. 10. - Волгоград, 2014. - № 26 (153). - С. 25-30.

- [16] Смоляр, В. А. Аналитическая аппроксимация средней энергии возбуждения в формуле Бете для тормозной способности вещества на основе модели атома Томаса – Ферми / В.А. Смоляр, Хай Кат Чан // Известия ВолгГТУ. Сер. Электроника, измерительная техника, радиотехника и связь. Вып. 11. - Волгоград, 2015. - № 3 (161). - С. 24-28.
- [17] Бураков, А. С. Высокоточная предсказательная полуэмпирическая формула для средней энергии возбуждения, полученная на основе модели атомов Томаса-Ферми / А.С. Бураков, Хай Кат Чан, В.А. Смоляр, А.В. Еремин // Известия ВолгГТУ. Сер. Электроника, измерительная техника, радиотехника и связь. Вып. 12. - Волгоград, 2015. - № 11 (176). - С. 7-11.
- [18] Смоляр, В. А. Периодические свойства средней энергии возбуждения в формуле Бете-Блоха для тормозной способности вещества / В.А. Смоляр, А.С. Бураков, Хай Кат Чан // Физико-математическое моделирование систем : матер. XIV междунар. семинара (г. Воронеж, 26-27 июня 2015 г.). Часть 1 / Воронежский гос. техн. ун-т, Ин-т проблем химической физики РАН. - Воронеж, 2015. - С. 179-185.
- [19] Чан, Хай Кат Высокоточная предсказательная полуэмпирическая формула для средней энергии возбуждения, полученная на основе модели атомов Томаса-Ферми / Хай Кат Чан, А. С. Бураков, В. А. Смоляр // Двадцать вторая всероссийская научная конференция студентов – физиков и молодых учёных ВНКСФ-22 (г. Ростов-на-Дону, г. Таганрог, 21-28 апр. 2016 г.): матер. конф. (информ. бюллетень): тез. докл. / Ассоциация

студентов – физиков и молодых учёных России, Южный федеральный ун-т [и др.]. - Екатеринбург; Ростов-на-Дону, 2016. - С. 75-76.

- [20] Чан, Хай Кат Аналитическая формула тормозной способности Бете с эффективным атомным номером и эффективным ионизационным потенциалом / Хай Кат Чан // Физико-математическое моделирование систем : матер. XIII междунар. семинара (г. Воронеж, 28-29 нояб. 2014 г.) / Воронежский гос. техн. ун-т, Ин-т проблем химической физики РАН. - Воронеж, 2014. - Ч. 1. - С. 112-118.
- [21] Чан Хай Кат, Использование формулы Гризинского для расчётов неупругого рассеяния электронов на атоме / Материалы IX молодежной международной научной – практической конференции. – Новосибирск, 2012. – С. 70 – 74.
- [22] Чан, Хай Кат Дифференциальное сечение углового неупругого рассеяния по теории Гризинского / Хай Кат Чан // Биология, химия, физика: вопросы и тенденции развития : матер. междунар. заоч. науч.-практ. конф. (1 февр. 2012 г.) / Сибирская ассоциация консультантов. - Новосибирск, 2012. - С. 142-146.
- [23] Силаков, М. В. Исследование численного моделирования на основе метода Монте-Карло для исследования и оптимизации процессов высокоэнергетической электронной литографии: дис. . . . канд. физ. – мат. наук / А. В. Силаков. – М., 2003. – 151 с.
- [24] Ryuichi, S. Monte Carlo modeling of electron-solid interactions / S. Ryuichi, Z. J. Ding // Rep. Prog. Phys. – 1992. – V. 55. – P. 487 – 531.

- [25] Мотт, Н. Теория атомных столкновений / Н. Мотт, Г. Месси; ред. Я. И. Френкеля – Пер. со 2-ого англ-ого изд. Т. А. Конторовой – М.: Иностранная Литература, 1965. – 752 с.
- [26] Dapor, M. Elastic scattering calculations for electrons and positrons in solid targets / M. Dapor // J. Appl. Phys. – 1996. – V. 79, N. 11. – P. 1-6.
- [27] Bunyan, P. J. Polarization by mercury of 100 to 2000 eV electrons / P. J. Bunyan, J. L. Schonfelder // Proc. Phys. Soc. – 1965. – V. 85. – P. 455-462.
- [28] Калашников, Н. П. Столкновения быстрых заряженных частиц в твердых телах / Н. П. Калашников, В. С. Ремизович, М. И. Рязанов // – М.: Атомиздат., 1980. – 272 с.
- [29] K.A. Olive et al. (Particle Data Group), Chin. Phys. C38, 090001 (2014) (<http://pdg.lbl.gov>) DOI:10.1088/1674-1137/38/9/090001
- [30] Seltzer, S. M. Evaluation of the collision stopping power of elements and compounds for electrons and positrons / S. M. Seltzer, M. J. Berger // Int. J. Appl. Radiat. Isot. – 1982. – T.33. – P.1189-1218.
- [31] M. J. Berger, M. Inokuti, H. H. Anderson, H. Bichsel, J. A. Dennis, D. Power, S. M. Seltzer, J. E. Turner, Stopping Powers for Electrons and Positrons (ICRU Report 37, International Commission on Radiation and Measurements, Bethesda, 1984)
- [32] F. Bloch Zur Bremsung rasch bewegter Teilchen beim Durchgang durch die Materie, Ann. Phys. 16, 285, 1933.
- [33] Hans A. Bethe, Intermediate Quantum Mechanics. Published by W.A. Benjamin, New York (1964) 276 p.

- [34] Ландау Л. Д., Квантовая механика / Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц.– М.: Государственное издательство физико-математической литературы, 1963.–702 с.
- [35] S. P. Ahlen, Theoretical and experimental aspects of the energy loss of relativistic heavily ionising particles, Rev. Modern Phys. 1980. V. 52, No. 1, P. 121-173.
- [36] Pekka Pyykkoe, Phys. Chem. Chem. Phys., 13, 161 (2011).
- [37] D. C. Joy and S. Luo, An empirical stopping power relationship for low-energy electrons, Scanning, vol. 11, pp. 176–180, 1989.
- [38] H. Shinotsuka, S. Tanuma, C.J. Powell, D.R. Penn, Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B 270 (2012) 75.
- [39] I.I. Maglevanny, V.A. Smolar, H.T.T. Nguyen, Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B 316 (2013) 123.
- [40] Бакалейников, Л. А. Определение функции выхода для электронов средних энергий на основе использования кинетического уравнения / Л. А. Бакалейников, С. Г. Конилов, К. Ю. Погребницкий и др. // ЖТФ. – 1994. – Том 64, Вып. 4. – С. 9-16.
- [41] Бакалейников, Л. А. Аналитический и численный походы к расчету функции выхода электронов средних энергий из однородных образцов / Л. А. Бакалейников, Е. Ю. Флегонтова, К. Ю. Погребницкий и др. // ЖТФ. – 2001. – Том 71, Вып. 7. – С. 14-20.
- [42] Смоляр, В. А. Распределение выделенной энергии и инжектированного заряда при нормальном падении на мишень пучка быстрых электронов / В.А.Смоляр, А. В. Еремин, В. В. Еремин // Журнал технической физики. - 2002. - Т.72, вып. 4. - С.46-52.

- [43] Kruglov, M. V., Solomin I. K., Lunev A. V. // Phys. Stat. Sol. (b). 1986. Vol. 133. P. 47–55.
- [44] Sempau, J., Fernandez-Varea, J.M., Acosta, E., Salvat, F. (2003). Experimental benchmarks of the Monte Carlo code PENELOPE. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B, Beam Interactions with Materials and Atoms, 207(2), 107-123.
- [45] Archard G. Backscattering of electrons / G. Archard. – J.Appl.Phys., – 1961. – T.32 – C.1505-1509.
- [46] Dashen R. F. Theory of electron backscattering / R. F. Dashen. – Phys.Rev., – 1964. – T.134 – C.A1025-A1032.
- [47] Kanaya K. Penetration and energy loss theory of electron in solid targets. / K. Kanaya., O. Okayama – J.Phys. D: Appl.Phys., – 1972. – V.5, № 1. – P.43-58.
- [48] Лебедь, В. И. Моделирование методом Монте-Карло процессов взаимодействия пучка электронов с твердым телом и возбуждения рентгеновского излучения : диссертация кандидата физико-математических наук / В. И. Лебедь. - Иркутск, 1984. - 189 с.
- [49] G.J. Lockwood, G.H. Miller, J.A. Halbleib, Sandia Laboratories Tech. Rep. SAND80-1968, Albuquerque, NM, 1981.