Моделирование методом Монте-Карло взаимодействия атомных частиц с конденсированной средой в приближении последовательных парных соударений

В.А.Курнаев, Н.Н.Трифонов

(Московский государственный инженерно-физический институт)

1.Введение

Метод статистических испытаний является мощным инструментом исследования различных параметров взаимодействия атомных частиц с конденсированной средой. При энергиях налетающих частиц существенно превышающих энергию связи атомов в веществе мишени весьма эффективно использование приближения последовательных парных соударений налетающей частицы с атомами среды. Первые компьютерные коды, реализующие этот алгоритм появились в начале 60-х годов и к настоящему времени получили широкое применение для определения таких интегральных и дифференциальных параметров взаимодействия атомных частиц с конденсированной средой как

коэффициенты отражения частиц $R_N = N_{отр}/N_0$,

коэффициенты внедрения частиц $1 - R_N$,

коэффициенты распыления вещества $S = N_{рас}/N_0$,

где $N_{отр}$, $N_{рас}$, N_0 число отраженных, распыленных и падающих частиц соответственно,а также

пространственные распределения внедренных частиц N(x,y,z),

энергетические распределения отраженных частиц : dN/dE –(интегральное по углам распределение) ,

$d^2N/dEd\Omega$ -энергетическое распределение частиц, отраженных под заданным углом,

угловые распределения отраженных частиц - $dN/d\Omega$.

Целью данной лабораторной работы является практическое знакомство с компьютерным кодом SCATTER, в котором использован алгоритм широко используемого кода TRIM [1] и определение с его помощью перечисленных выше параметров взаимодействия при бомбардировке атомов различной массы и энергии с произвольным углом падения на поверхность. мишеней различного атомного состава и толщины.

2. Описание используемой модели

2.1 Движение атомов в веществе

Движение атомов в конденсированном веществе описывается как последовательность парных упругих столкновений с атомами среды. Среднее расстояние между атомами мишени полагается постоянным для данной среды. Сразу после столкновения состояние атома по отношению к фиксированной декартовской системе координат определяется координатами $\vec{r} = (x, y, z)$, углами направления движения $\vec{r} = (x, y, z)$ и энергией T. Местоположение атома после следующего столкновения (рис. 1):

$$\vec{r}\,' = \vec{r} + (\lambda - \tau) \cdot \vec{e}_r , \tag{1}$$

где $\vec{e}_r = (\cos\alpha, \cos\beta, \cos\gamma)$; τ - расстояние асимптотической точки отклонения от плоскости (интеграл времени), которая определяется первоначальным положением атома мишени (рис. 2), λ - длина свободного пробега налетающей частицы.

Каждое столкновение характеризуется полярным углом отклонения ψ и азимутальным углом отклонения φ. Новое направление частицы будет определяться из следующих уравнений:

$$\cos\alpha' = \cos\psi \cos\alpha + \sin\psi \cos\varphi \sin\alpha \tag{2}$$

$$\cos\beta' = \cos\psi \ \cos\beta - \frac{\sin\psi}{\sin\alpha}(\cos\varphi \cos\alpha \cos\beta - \sin\varphi \cos\gamma)$$

$$\cos\gamma' = \cos\psi \ \cos\gamma - \frac{\sin\psi}{\sin\alpha}(\cos\varphi \cos\alpha \cos\gamma + \sin\varphi \cos\beta),$$

а энергия частицы:

$$T' = T - \Delta E_{el} - \Delta E_n , \tag{3}$$

где T и T' - энергия до и после столкновения, ΔE_{el} - энергия отдачи, переданная атому мишени, ΔE_n - электронные (неупругие) потери энергии при столкновении.

Атом мишени для каждого столкновения выбирается внутри диска радиусом $p_{\max}$. Значение $p_{\max}$ определяется следующим образом:

$$p_{\max} = \pi^{-1/2}\sigma^{1/2}, \tag{4}$$

где σ - полное сечение упругого рассеяния.

Прицельный параметр столкновения определяется путем розыгрыша случайного числа R:

$$p = p_{\max}\sqrt{\mathrm{R}} . \tag{5}$$

Расположение атома мишени внутри диска определяется азимутальным углом отклонения, который разыгрывается при помощи случайного числа R согласно:

$$\varphi = 2\pi R \,. \qquad (6)$$

2.2 Потенциал взаимодействия, функция экранировки

В данной модели применяется экранированный кулоновский потенциал вида:

$$V(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r}\Phi(r/a) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{a(r/a)}\Phi(r/a) = \frac{C}{r/a}\Phi(r/a), \qquad (7)$$

где Z_1, Z_2 – заряды взаимодействующих частиц, a – длина экранировки, $\Phi(r/a)$ – функция экранировки.

Длина экранировки a имеет следующий вид:

$$a = \left(\frac{9\pi^2}{128}\right) a_B Z_{12}^{-1/3} = 0{,}8853 a_B Z_{12}^{-1/3}\,, \qquad (8)$$

где a_B представляет собой радиус Бора, $Z_{12} = (Z_1^{1/2} + Z_2^{1/2})^2$ – эффективный заряд по Фирсову.

Функция $\Phi(r/a)$ аппроксимируется выражением:

$$\Phi(r/a) = \sum_{i=0}^{n} C_i \exp(-D_i r/a), \qquad \sum_{i=1}^{n} C_i = \Phi(0) = 1\,, \qquad (9)$$

где C_1 =.0,190945, C_2 =.0,473674, C_3 =.0,335381, D_1 = 0,278544, D_2 = 0,637174, D_3 = 1,919249 (потенциал Kr-C).

2.3 Определение угла отклонения и интеграла времени

Угол рассеяния θ в системе центра масс вычисляется в виде суммы ряда:

$$\theta = \pi - \left(2p/R_0\right)\frac{\pi}{n}\sum_{i=1}^{n} b_i b_{n-i+1}\left[g\left(R_0/b_i^2\right)\right]^{-1}, \qquad (10)$$

а интеграл времени:

$$\tau = \sqrt{R_0^2 - p^2} - R_0\frac{\pi}{n}\sum_{i=1}^{n} b_i b_{n-i+1}\frac{1}{b_i^4}\left\{\left[g\left(R_0/b_i^2\right)\right]^{-1} - \left[\overline{g}\left(R_0/b_i^2\right)^2\right]^{-1}\right\}, \qquad (11)$$

где $b_i = \cos\frac{2i-1}{4n}\pi$, n – число узлов при суммировании (в программе выбирается равным 1000), p - прицельный параметр, R_0 – расстояние наибольшего сближения. Функции $g(r)$ и $\overline{g}(r)$ определены следующим образом:

$$g(r) = \sqrt{1 - \frac{V(r)}{E_r} - \frac{p^2}{r^2}}, \ \overline{g}(r) = \sqrt{1 - \frac{p^2}{r^2}}. \qquad (12)$$

Здесь $V(r)$ - потенциал взаимодействия, E_r - полная кинетическая энергия частиц в системе центра масс. Расстояние наибольшего сближения двух сталкивающихся атомов определяется как решение уравнения:

$$g(R_0) = 0. \qquad (13)$$

Угол отклонения в лабораторной системе координат определялся соответственно:

$$\tan\psi = \frac{\sin\Theta}{\frac{m_1}{m_2} + \cos\Theta}, \qquad (14)$$

где m_1 - масса налетающей частицы, m_2 - масса атома мишени.

2.4 Вычисление длины свободного пробега

Для вычисления длины свободного пробега λ между двумя столкновениями используется модель, в которой. плотность вероятности для величины λ распределена следующим образом:

$$f(\lambda)d\lambda = N\sigma\exp(-N\sigma\lambda)d\lambda, \qquad (15)$$

где N – атомная плотность мишени, σ - полное сечение рассеяния.

Из (15) следует связь между средней длинной свободного пробега $\lambda_0 = 1/N\sigma$ и случайным числом R:

$$\lambda = -\lambda_0 \ln(1-R). \qquad (16)$$

Полное сечение рассеяния вычисляется по следующей формуле:

$$\sigma = 2\pi \int_0^{p_{\max}} p dp = \pi p_{\max}^2 . \qquad (17)$$

Выбор верхнего предела интегрирования равным $p_{\max}$ вызван необходимостью ограничить полное сечение рассеяния. Значения $p_{\max}$ выбирается таким образом, чтобы соответствующий угол рассеяния θ был равен величине $\theta_{\min}$, при этом рассеяниями на меньшие углы пренебрегают. При энергиях ниже некоторой пороговой значение средней длины свободного пробега может оказаться меньше, чем межатомное расстояние $d_a = N^{1/3}$. Тогда средняя длина свободного пробега полагается равной межатомному расстоянию $\lambda_0 = d_a = N^{-1/3}$, а полное сечение получается равным $\sigma = N^{-2/3}$.

2.5 Вычисление упругих потерь энергии

При вычислении упругих потерь энергии ΔE_{el} налетающего атома считается, что состояние системы до и после столкновения остается постоянным, т.е. пренебрегается влиянием неупругих потерь энергии на упругие потери. Тогда для ΔE_{el} справедливо следующее выражение:

$$\Delta E_{el} = \frac{4 m_1 m_2}{(m_1 + m_2)^2} \sin^2 \frac{\theta}{2} . \qquad (18)$$

Атом мишени, на котором рассеялся налетающий атом, считается выбитым, если переданная ему энергия превосходит объемную энергию связи с веществом E_b.

2.6 Неупругие потери энергии

В модели считается, что неупругие потери энергии являются локальными. В соответствием с этим предположением в единичном акте столкновения неупругие потери энергии вычисляются по формуле Оена-Робинсона [1]:

$$\Delta E_n(p, T_0) = C_E \frac{d^2}{2} \frac{K\sqrt{T_0}}{\pi a^2} \exp\left[- d\, R_0(p, T)/a\right],$$

$$K = 1{,}21 \frac{Z_1^{7/6} Z_2}{\left(Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3}\right)^{3/2}} \sqrt{\frac{1}{M_1}} ,$$

где C_E - подгоночный параметр для учета средних потерь энергии, d - дополнительный подгоночный параметр, учитывающий статистический характер флуктуаций неупругих потерь энергии, M_1 - масса налетающей частицы в а.е.м.

2.7 Начальные условия

Частицы с энергией T_0 падают на мишень под фиксированным углом α_0. Плоскость $x = 0$ соответствует поверхности мишени, $x>0$ -внутренняя область мишени.

Начальная энергия частицы и направление ее движения после старта изменяются в зависимости от энергии связи частицы на поверхности E_S:

$$T_0' = T + E_s, \tag{20}$$

$$\cos\alpha_0' = \left(\frac{T_0 \cos^2\alpha_0 + E_s}{T_0 + E_s} \right)^{1/2}, \tag{21}$$

$$\cos\beta_0' = \cos\beta_0 \frac{\sin\alpha_0'}{\sin\alpha_0},$$

$$\cos\gamma_0' = \cos\gamma \frac{\sin\alpha_0'}{\sin\alpha_0}.$$

Первая точка столкновения частицы с атомом мишени определяется путем разыгрывания случайного числа λ:

$$x_1 = x_0 + \lambda \cos\alpha_0, \tag{22}$$

$$y_1 = y_0 + \lambda \cos\beta_0,$$

$$z_1 = \mathrm{z}_0 + \lambda \cos\gamma_0.$$

2.8. Граничные условия

Для учета влияния энергии связи на поверхности при уходе с нее частицы используется модель планарного поверхностного порога. В случае, если нормальная составляющая энергии частицы $T\cos^2\alpha$ меньше, чем энергия связи частицы на поверхности E_S, частица "отражается" обратно к поверхности с новым направлением:

$$\cos\alpha' = -\cos\alpha. \tag{23}$$

В противном случае частица рассматривается как покинувшая поверхность.
При этом ее энергия меняется в соответствии с формулой:

$$T' = T - E_s, \qquad (24)$$

а направление движения

$$\cos\alpha' = \left(\frac{T_0\cos^2\alpha - E_S}{T_0 - E_S}\right)^{1/2}, \qquad (25)$$

$$\cos\beta' = \cos\beta\ \frac{\sin\alpha'}{\sin\alpha},$$

$$\cos\gamma' = \cos\gamma\ \frac{\sin\alpha'}{\sin\alpha}.$$

2.9 Прекращение движения частиц

Частица считается остановившейся в том случае, если она затормозилась до заданной энергии остановки E_{stop}, значение которой выбирается больше или равной энергии связи на поверхности E_S.

3.О работе с кодом

Откроете файл SCATTER exe. На мониторе появится окно с меню, включающем возможность выбора параметров взаимодействия (param) или варианты отображения на экране монитора траекторий частиц в веществе и параметров вывода изображения траекторий на печать(options). При «нажатиии» param появляется заставка с окнами для ввода параметров задачи взаимодействия Вводятся химические символы падающей частицы, энергия падающих частиц, угол падения (относительно нормали к поверхности мишени), энергия связи атомов мишени (Surface binding energy), остаточная энергия, при которой можно прекратить дальнейшие вычисления (Cutoff energy), число падающих частиц. В нижнем окне задаются химический символ атомов мишени, и ее толщина. Возможно задание 3х слоев мишени различного состава. Если введенные параметры Вас удовлетворяют, нажмите OK, появится окно с «кнопкой» запуска START. При запуске программы траектории частиц на экране отображаются траектории движущихся частиц и атомов отдачи по мере их расчета. В конце вычислений на экран выводятся значения коэффициентов отражения (R_n и распыления S). По результатам расчета можно также вывести на экран распределения первичных частиц (projectiles) по глубине (depth), их угловые распределения (проинтегрированные по азимутальному углу) в случае отражения, а также распределения отраженных частиц по энергии (energy) в двух энергетических интервалах. Подобные же данные можно вывести и для распыленных частиц мишени (components)

4. Примеры заданий:

1. Получить зависимость для максимума профиля внедренных частиц от угла падения. Расчет провести для атомов водорода, бомбардирующих с энергией 500 эВ поверхность железной мишени.
2. Получить зависимость для максимума профиля внедренных частиц от начальной энергии налетающих частиц (100-10000 эВ). Расчет провести для атомов водорода бомбардирующих по нормали поверхность железной мишени.
3. Получить зависимость коэффициента распыления от угла падения налетающих частиц. Расчет провести для атомов аргона бомбардирующих с энергией 5000 эВ поверхность медной мишени.
4. Получить зависимость коэффициента распыления от начальной энергии налетающих частиц (100-10000 эВ). Расчет провести для атомов аргона, бомбардирующих по нормали поверхность железной мишени.

Литература

1. В.Экштейн // Компьютерное моделирование взаимодействия атомных частиц с твердым телом// М. Мир