

01;05;10

Распределение выделенной энергии и инжектированного заряда при нормальном падении на мишень пучка быстрых электронов

© В.А. Смоляр, А.В. Еремин, В.В. Еремин

Волгоградский государственный технический университет,
400131 Волгоград, Россия
e-mail: rector@vstu.ru

(Поступило в Редакцию 23 июля 2001 г.)

В рамках диффузионной модели кинетического уравнения для пучка электронов, падающих по нормали на мишень, получены аналитические формулы для распределений выделенной энергии и инжектированного заряда. При этом в теорию не вводят эмпирические подгоночные параметры. Вычисленные распределения выделенной энергии для плоского направленного источника электронов в бесконечной среде для C , Al , Sn и Pb хорошо согласуются с данными Спенсера, полученными на основе точного решения кинетического уравнения Бете, которое является исходным и в предположении диффузионной модели.

Введение

В работе [1] показано, что на основе диффузионного приближения кинетического уравнения можно построить модель обратного рассеяния и проникновения пучка электронов, падающего на мишень. При этом в отличие от исходной диффузионной модели Бете [2] и построенных на ее основе полумпирических моделей [3] в теорию не требуется вводить какие-либо подгоночные параметры, чтобы получить приемлемое соответствие вычисленных коэффициентов обратного рассеяния с экспериментальными данными по обратному рассеянию электронов. Наряду с другими известными аналитическими способами упрощения кинетического уравнения [4] диффузионная модель, построенная без введения в теорию эмпирических подгоночных параметров и доведенная до конечных аналитических выражений для обратного рассеяния и проникновения, дополняет аналитическими методами имеющиеся в настоящее время пакеты программ для численных расчетов методом Монте-Карло (программа ETRAN [5]) или численных расчетов с применением полумпирических алгоритмов (программа EDMULT [6]). Предложенная в [1] модель является математически замкнутым диффузионным приближением кинетического уравнения, поэтому хорошее соответствие вычисленных коэффициентов обратного рассеяния с измеренными в эксперименте дает основание надеяться, что при вычислении распределений выделенной энергии и инжектированного заряда также не потребуется вводить в теорию эмпирических подгоночных параметров.

Основные положения диффузионной модели кинетического уравнения

Кинетическое уравнение Бете, записанное для плотности электронов $f(\mathbf{r}, \Omega, t)$ в пространстве координат \mathbf{r} и направлений движения Ω в момент времени t , однозначно связанный с пройденным путем s , в обозначениях

Бете имеет вид [2]

$$\frac{\partial f}{\partial s} = \frac{\partial f}{v \partial t} = -\Omega \cdot \nabla f + \int d\Omega' N \sigma(v, \Omega' \cdot \Omega) \times [f(\mathbf{r}, \Omega, t) - f(\mathbf{r}, \Omega', t)], \quad (1)$$

где v — скорость электронов, s — путь по траектории, N — число атомов в единице объема, σ — дифференциальное сечение рассеяния.

В задачу о падающем на мишень пучке электронов следует добавить источник на поверхности мишени, испускающий электроны вдоль оси z , направленной по внутренней нормали к поверхности \mathbf{n} ,

$$S(\mathbf{r}, \Omega, s) = S_0 \delta(x) \delta(y) \delta(z) \delta(\mathbf{n} - \Omega) \delta(s), \quad (2)$$

где S_0 — интенсивность источника — число электронов, испускаемых в единицу времени.

Проникая в мишень, пучок рассеивается и постепенно изотропизируется. Когда анизотропия электронов по направлениям движения становится малой, применяется диффузионное приближение, в котором при разложении $f(\mathbf{r}, \Omega, t)$ по полиномам Лежандра можно ограничиться двумя первыми слагаемыми,

$$f(\mathbf{r}, \Omega, s) = \frac{1}{4\pi} (f(\mathbf{r}, s) + 3\Omega \cdot \mathbf{J}(\mathbf{r}, s)), \quad (3)$$

где

$$F(\mathbf{r}, s) = \int f(\mathbf{r}, \Omega, s) d\Omega$$

— плотность электронов,

$$\mathbf{J}(\mathbf{r}, s) = \int \Omega f(\mathbf{r}, \Omega, s) d\Omega$$

— вектор плотности потока электронов.

В результате кинетическое уравнение (1) сводится к уравнению диффузии

$$\frac{\partial F}{\partial s} = -\frac{\lambda(s)}{3} \Delta F \quad (4)$$

и уравнению для диффузионного потока

$$\mathbf{J} = -\frac{\lambda(s)}{3} \nabla F. \quad (5)$$

Здесь λ — транспортная длина, определяемая интегралом

$$\frac{1}{\lambda(s)} = 2\pi \int_0^\pi \sin(\Theta) d\Theta (1 - \cos(\Theta)) N \sigma(\Theta, v(s)), \quad (6)$$

где Θ — угол рассеяния.

На границе отсутствует поток из свободного пространства внутрь мишени, кроме падающего потока (2), т.е.

$$f(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}, s) = 0, \quad \boldsymbol{\Omega} \cdot \mathbf{n} > 0, \quad s > 0. \quad (7)$$

Условие (7) невозможно выполнить в диффузионном приближении (4), однако можно потребовать его выполнения в среднем по направлениям внутрь мишени. Подставив (4) и (5) в (3) и усреднив по углам поток электронов внутрь мишени, получим граничное условие

$$F(x, y, 0, s) = \frac{2\lambda}{3} \frac{\partial F}{\partial z}(x, y, 0, s). \quad (8)$$

Таким образом, основные положения диффузионной модели формулируются следующим образом.

I. Кинетическое уравнение (1) заменяется уравнениями (4) и (5), и это означает, что в основе модели лежит диффузионное приближение.

II. Падающий поток (2) заменяется изотропным источником, который помещается на глубине полной диффузии z_d и испускает электроны с энергией E_0 , но с уменьшенным на величину z_d начальным пробегом.

III. На границе со свободным пространством накладывается дополнительное условие (7), требующее отсутствия диффузионного потока в мишень из свободного пространства.

Аналитическое решение задачи о падающем на полубесконечную мишень пучке электронов

В приближении непрерывного замедления, в котором записано исходное кинетическое уравнение (1), путь электрона в мишени получается интегрированием обратной величины средних потерь энергии электрона на единице пути

$$s(E_0, E) = \int_E^{E_0} \frac{dE}{\langle \varepsilon(E) \rangle}. \quad (9)$$

По определению,

$$\langle \varepsilon(E) \rangle = \int_0^{\varepsilon_{\max}} \varepsilon w_{\text{incl.}}(E, \varepsilon) d\varepsilon, \quad (10)$$

где $w_{\text{incl.}}(E, \varepsilon)$ — число столкновений электрона на единице пути с потерей энергии ε ; ε_{\max} — максимальная потеря энергии.

В качестве глубины полной диффузии примем среднее смещение остановившихся электронов, испускаемых плоским источником, погруженным в бесконечную рассеивающую среду, по нормали к плоскости источника. Формула для среднего смещения таких электронов в зависимости от величины остаточного пробега получена Льюисом [7] и имеет вид

$$\langle z(r) \rangle = \frac{R_0}{d+1} (1 - r^{d+1}),$$

где $R_0 = s(E_0, 0)$ — начальный пробег падающих на мишень электронов; $r = R(E)/R_0$ — остаточный пробег; $d = R_0/\lambda$.

Воспользовавшись этим выражением, получим положение изотропного источника, заменившего падающий поток — глубину полной диффузии,

$$z_d \equiv \langle z(r=0) \rangle = \frac{R_0}{d+1}. \quad (11)$$

В соответствии с положением II диффузионной модели путь ξ , пройденный диффундирующими электронами, связан с полным путем, пройденным электронами от точки входа в мишень, вычисленным по формуле (9), соотношением

$$\xi = \frac{R_0 - z_d}{R_0} s(E_0, E).$$

Таким образом, математическая формулировка диффузионной модели задачи (1), (2) с падающим потоком электронов единичной интенсивности имеет вид уравнения диффузии с δ -образным источником

$$\frac{\partial F}{\partial \xi} = -\frac{\lambda(\xi)}{3} \Delta F + \delta(x)\delta(y)\delta(z - z_d)\delta(\xi) \quad (12)$$

и граничным условием

$$\frac{1}{2} F(x, y, 0, \xi) = \frac{\lambda(\xi)}{3} \frac{\partial F}{\partial z}(x, y, 0, \xi). \quad (13)$$

Задача (12), (13) может быть решена численно стандартными методами. Для аналитического решения задачи введем новую переменную — ”возраст” электронов

$$\tau(\xi) = \frac{1}{3} \int_0^\xi \lambda(\xi) d\xi \quad (14)$$

и усредним коэффициент диффузии в граничном условии (13). После этого уравнение диффузии (12) и условие на границе (13) примут вид

$$\frac{\partial F}{\partial \tau} = \Delta F + \delta(x)\delta(y)\delta(z - z_d)\delta(\tau), \quad (15)$$

$$F(x, y, 0, \tau) = \frac{2}{3} \langle \lambda \rangle \frac{\partial F}{\partial z}(x, y, 0, \tau) \quad (16)$$

и будут иметь постоянные коэффициенты. Здесь $\langle \lambda \rangle$ — усредненная по возрасту электронов транспортная длина

$$\langle \lambda \rangle = \frac{1}{\tau_0} \int_0^{\tau_0} \lambda(\tau) d\tau,$$

где τ_0 — возраст остановившихся электронов, вычисленный по формуле (14) с верхним пределом интеграла, равным $R_0 - z_d$.

Решение задачи (15), (16) дает плотность электронов с возрастом τ и имеет вид

$$F(x, y, z, \tau) = \left\{ \frac{1}{2\sqrt{\pi\tau}} \left[\exp\left(-\frac{(z-z_d)^2}{4\tau}\right) + \exp\left(-\frac{(z+z_d)^2}{4\tau}\right) \right] - a \exp(a^2\tau + a(z+z_d)) \times \operatorname{erfc}\left(a\sqrt{\tau} + \frac{z+z_d}{2\sqrt{\tau}}\right) \right\} \left(\frac{1}{2\sqrt{\pi\tau}} \right)^2 \exp\left(-\frac{x^2+y^2}{4\tau}\right), \quad (17)$$

где введено обозначение $a = 2\langle \lambda \rangle / 3$.

Плотность остановившихся электронов, вычисленная по формуле (17) и умноженная на заряд электрона, представляет собой распределение в мишени инжектированного заряда при единичной интенсивности падающего пучка электронов. При интенсивности пучка S_0 электронов в секунду получим распределение плотности инжектированного за единицу времени заряда

$$\frac{dQ(x, y, z)}{dV} = S_0 e F(x, y, z, \tau_0), \quad (18)$$

где e — заряд электрона, dV — элемент объема.

Коэффициент обратного рассеяния можно получить, вычтя из единицы проинтегрированную по объему мишени плотность остановившихся электронов, вычисленную по (17) для остановившихся электронов. Полученная таким образом формула для коэффициента обратного рассеяния имеет вид

$$b = \operatorname{erfc}\left[\frac{z_d}{2\sqrt{\tau_0}}\right] - \exp(a^2\tau_0 + az_d) \operatorname{erfc}\left(a\sqrt{\tau_0} + \frac{z_d}{2\sqrt{\tau_0}}\right). \quad (19)$$

Вычислим теперь плотность энергии, выделенной электронным пучком в мишени (кратко — плотность энерговыделения, которую обозначим $dW(x, y, z)/dV$). По определению, плотность энерговыделения равна энергии, теряемой всеми электронами в единице объема за 1 с поэтому

$$\frac{dW}{dV} = \int_0^{E_0} F(x, y, z, E) \xi(E) dE, \quad (20)$$

где $F(x, y, z, E)dE$ — число электронов с энергией в интервале dE вблизи E в единице объема; $\xi(E) = |dE/dt|$ — средняя энергия, теряемая электроном с энергией E за 1 с.

Учитывая, что

$$F(x, y, z, E)dE = F(x, y, z, t(E))dt,$$

получим вместо (20)

$$\frac{dW}{dV} = \int_0^{E_0} F(x, y, z, t(E))dE, \quad (21)$$

где $F(x, y, z, t)$ — решение кинетического уравнения (1), проинтегрированное по всем направлениям и имеющее в диффузионном приближении вид (17).

Заметим, что до сих пор мы не использовали каких-либо особенностей рассеяния частиц пучка. По этой причине все сказанное выше может относиться в равной степени к электронам, позитронам или легким ионам. Для доведения вычислений до числа необходимо задать сечения упругого и неупругого рассеяний в формулах для транспортной длины (6) и потерь энергии на единице длины пути (10) для данного вещества и данной энергии проникающих в мишень частиц.

Результаты вычислений и их обсуждение

Вещество мишени и энергия электронов входят в диффузионную модель не через сечения упругого и неупругого рассеяния, как в исходном кинетическом уравнении (1), а через транспортную длину и средние потери энергии электрона на единице пути. Для вычисления транспортной длины и средних потерь на единице пути использовались стандартные формулы, взятые из работы

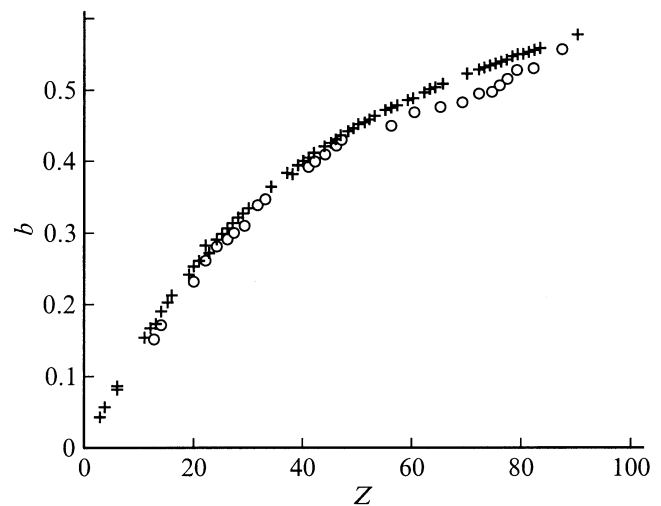


Рис. 1. Теоретические (крестики) и экспериментальные [9] (кружки) значения коэффициентов обратного рассеяния при нормальном падении на мишень пучка электронов с энергией 40 кэВ.

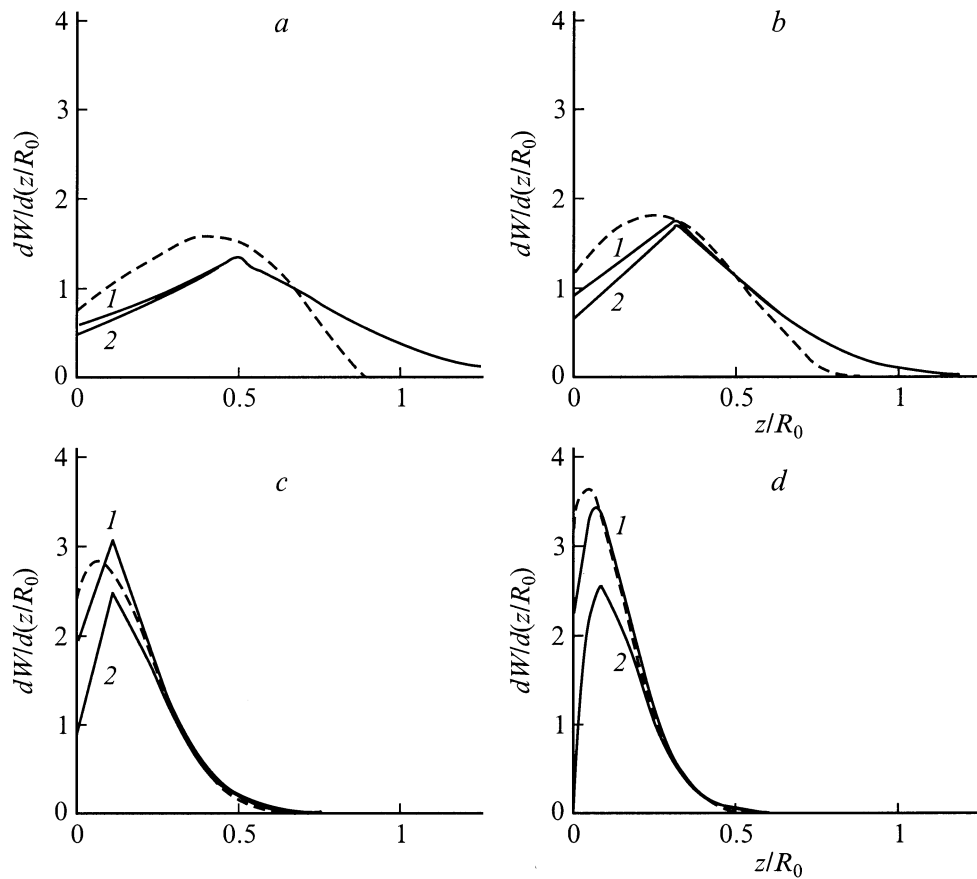


Рис. 2. Распределение выделенной энергии для плоского направленного источника электронов с энергией E_0 в бесконечной рассеивающей среде (штриховые кривые — точные решения [12], сплошные кривые 1 — диффузионная модель) и в полубесконечной мишени (сплошные кривые 2 — диффузионная модель). Линейная плотность выделенной энергии $dW/d(z/R_0)$ переводится в размерные единицы множителем E_0/R_0 и соответствует единичной интенсивности источника. a — C, b — Al, c — Sn, d — Pb; $E_0 = 25$ (a, b); 50 (c); 100 keV (d).

Спенсера [8],

$$\frac{1}{\lambda(T)} = 2\pi r_e^2 N(Z+1) \frac{(T+1)^2}{T^2(T+2)^2} \times [\ln(1+1/\eta) - 1/(1+\eta)], \quad (22)$$

$$\langle \varepsilon(T) \rangle = 4\pi r_e^2 NZ \frac{(T+1)^2}{T(T+2)} \ln[1.166T/I(Z)], \quad (23)$$

где $T = E/mc^2$ — энергия, выраженная в единицах энергии покоя электрона, r_e — классический радиус электрона, N — число атомов в единице объема,

$$\eta = 1.75 \cdot 10^{-5} Z^{2/3} / [T(T+2)]$$

— параметр экранирования ядра атомными электронами,

$$I(Z) = \begin{cases} 13.6Z, & Z < 10, \\ (9.76 + 58.8Z^{-1.19})Z, & Z \geq 10 \end{cases}$$

— средний ионизационный потенциал атомов мишени в электрон-вольтах.

Формулы (22) и (23) справедливы для энергий от $I(Z)$ до 1 MeV, когда потери энергии определяются ионизацией и возбуждением атомов, а радиационными потерями можно пренебречь.

Сравнение вычисленных по формуле (19) коэффициентов обратного рассеяния при нормальном падении пучка электронов на мишень с экспериментальными данными [9] показано на рис. 1. Вычисления были выполнены для твердых элементов от лития до урана, плотности которых приведены в [10]. Из рис. 1 видно, что диффузионная модель позволяет вычислить коэффициент обратного рассеяния с хорошей точностью. Однако диффузионная модель не позволяет выявить периодичность величины коэффициента обратного рассеяния от атомного номера мишени, найденную теоретически в работе [11].

Хорошей проверкой соответствия модельных расчетов энерговыделения физической реальности могут быть таблицы распределения плотности выделенной энергии энергии в графите, алюминии, олове и свинце, опубликованные Национальным бюро стандартов США [12], выполненные на основе работы Спенсера [8]. Такое

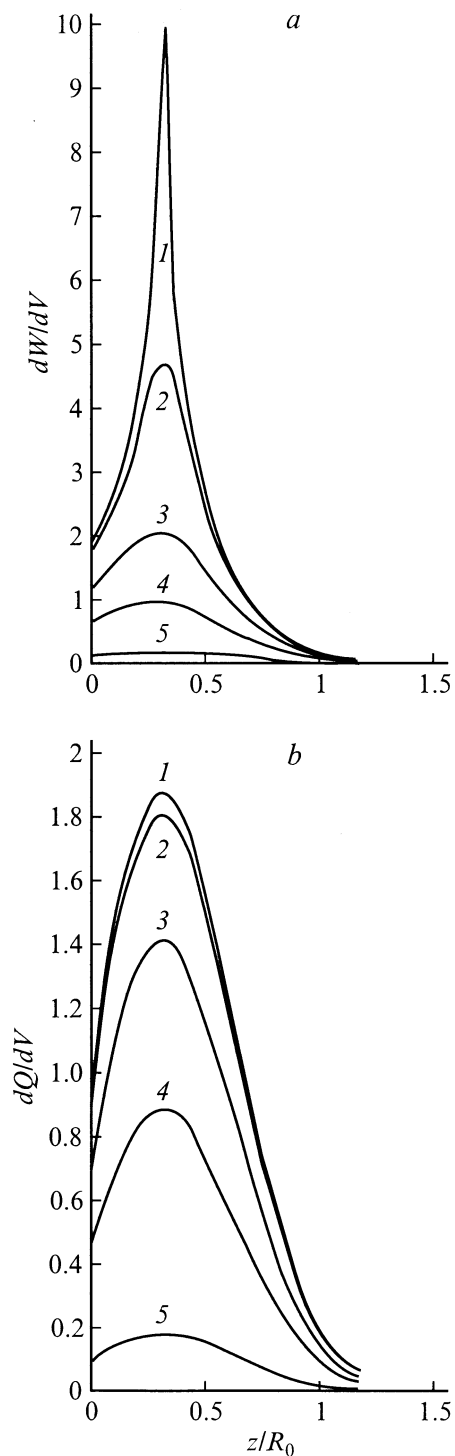


Рис. 3. Профили распределения плотности выделенной энергии (а) и инжектированного заряда (б) в полубесконечной алюминиевой мишени при нормальном падении острофокусированного пучка электронов с энергией E_0 , равной 25 keV, на расстояниях r от оси пучка, измеренных в единицах начального пробега R_0 для $r/R_0 = 0.05$ (1), 0.1 (2), 0.25 (3), 0.4 (4), 0.7 (5). Плотность выделенной энергии dW/dV переводится в размерные величины множителем E_0/R_0^3 . Плотность инжектированного заряда dQ/dV переводится в размерные величины множителем e/R_0^3 , где e — заряд электрона. Эти величины соответствуют единичной интенсивности источника.

Вещество	E_0, keV	b	b_E	$\langle E_b \rangle / E_0$	W/E_0	W_s/E_0
C	25	0.073	0.051	0.703	0.949	0.972
Al	25	0.159	0.118	0.741	0.882	0.923
Sn	50	0.415	0.343	0.824	0.656	0.787
Pb	100	0.512	0.437	0.852	0.563	0.725

Примечание. b — коэффициент обратного рассеяния, b_E — коэффициент обратно рассеянной энергии (отношение энергии обратно рассеянных электронов к энергии электронов падающего пучка), $\langle E_b \rangle / E_0$ — отношение средней энергии, приходящейся на один обратно рассеянный электрон, к энергии падающего электрона; W/E_0 и W_s/E_0 — отношение поглощенной в мишени энергии, приходящейся на один электрон падающего пучка, к энергии падающего электрона, вычисленное в предлагаемой модели и взятое из таблиц Спенсера [12].

сравнение представляется интересным еще и потому, что кинетическое уравнение Бете является исходным и в предлагаемой диффузионной модели. Спенсер исходит из кинетического уравнения Бете (1) и решает задачу об энергосвободении моноэнергетического источника электронов, помещенного в бесконечную рассеивающую среду. При этом в теорию не вводятся подгонные параметры, а энергосвободение выражается через двойные пространственно-пробежные моменты коэффициентов разложения $f(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}, t)$ по полиномам Лежандра. Вычисления Спенсера построены так, что в них ищется не решение кинетического уравнения, а непосредственно плотность выделенной энергии. Выполненные нами вычисления тормозной способности, полного траекторного пробега и транспортной длины упругого рассеяния для алюминия при энергии электронов 25 keV по сечениям, приведенным в базе данных Физико-технического института им. А.Ф. Иоффе РАН [13], практически совпадают с соответствующими величинами, взятыми из таблиц Спенсера [12].

На рис. 2 вычисленное нами по формуле (21) и проинтегрированное по поперечным к оси z координатам распределение выделенной энергии, т.е. распределение линейной плотности выделенной энергии от широкого пучка моноэнергетических электронов, сравнивается с вычислениями Спенсера [12]. В этой работе Спенсера протабулировано распределение линейной плотности выделенной энергии для плоского источника электронов, погруженного в бесконечную среду и испускающего моноэнергетические электроны по нормали к плоскости в одну сторону от нее. Расхождение между вычисленными нами для полубесконечной мишени и взятыми из таблиц величинами выделенной энергии в бесконечной среде отчасти обусловлено тем, что в бесконечной среде электроны в процессе проникновения и многократного рассеяния могут оказаться слева от плоскости источника, испускающего электроны вправо вдоль оси z , и затем снова перейти в правую половину пространства. Такие переходы могут повторяться неоднократно, и следствием этого должна быть большая плотность выделенной энергии в бесконечной среде вблизи плоскости источника справа от нее, чем в полубесконечной мишени вбли-

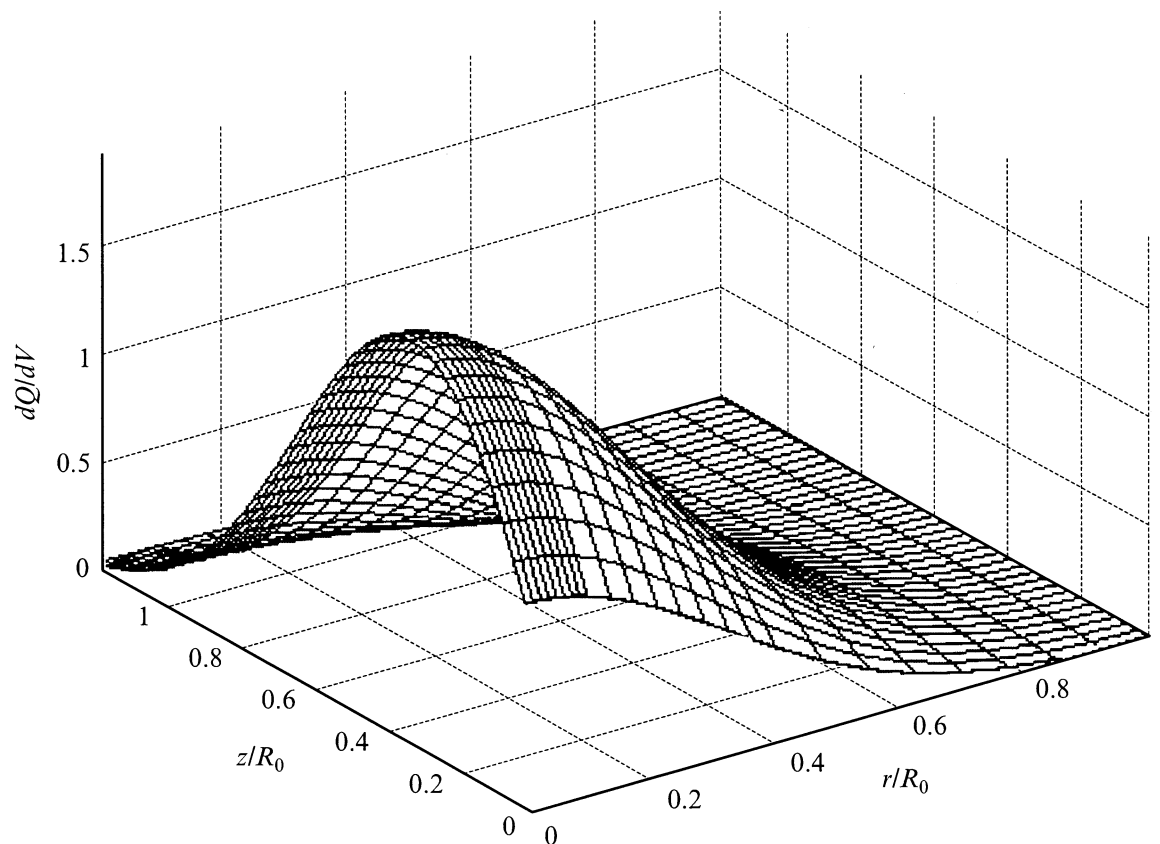


Рис. 4. Распределение плотности инжектированного заряда в полубесконечной алюминиевой мишени при нормальном падении острофокусированного пучка электронов с энергией $E_0 = 25$ keV. Ось z направлена по нормали к поверхности из точки падения пучка, r — расстояние от оси z . Плотность инжектированного заряда dQ/dV переводится в размерные величины множителем e/R_0^3 , где e — заряд электрона, и соответствует единичной интенсивности источника; R_0 — начальный пробег электронов.

зи бомбардируемой поверхности. Диффузионная модель позволяет увидеть эффект уменьшения плотности выделенной энергии вблизи от бомбардируемой поверхности по сравнению с бесконечной средой, как это видно на рис. 2. Коэффициенты обратного рассеяния и доли обратно рассеянной энергии, приведенные в таблице, получены интегрированием по пространству плотностей выделенной энергии и инжектированного заряда, представленных на рис. 2.

Соответствие вычислений по диффузионной модели точным решениям тем лучше, чем больше атомный номер вещества мишени и чем меньше энергия электронов по сравнению с начальной. Эта особенность диффузионной модели наблюдается и для распределений выделенной энергии и видна из графиков, показанных на рис. 2.

Следует ожидать, что вычисленное в диффузионной модели распределение инжектированного заряда должно лучше соответствовать физической реальности, чем распределение выделенной энергии, так как эта характеристика переноса является более интегральной. Из рис. 3 видно, что вычисленные по формулам (17) и (18) распределения плотностей инжектированного за-

ряда и выделенной энергии острофокусированным пучком, падающим по нормали на поверхность мишени, сильно отличаются друг от друга. Резкий максимум плотности энерговыделения на глубине полной диффузии определяется тем, что, согласно диффузионной модели, падающий поток заменяется на изотропный источник электронов в этой точке. Здесь наиболее сильно проявляется несоответствие диффузионной модели физической реальности. Для широкого пучка электронов и плоской геометрии этот эффект сглаживается, хотя и остается заметным, как это видно из кривых, приведенных на рис. 2. Распределение плотности инжектированного заряда — это в сущности распределение остановившихся электронов. Видимо, по этой причине не так важно, каким был источник электронов — падающим на поверхность пучком или изотропным и расположенным на глубине полной диффузии. Рис. 4 дает детальное трехмерное изображение распределения плотности инжектированного заряда, вычисленного по формуле (18), из которого видно, насколько сильно сглажено это распределение по сравнению с распределением выделенной энергии.

Таким образом, предлагаемая модель является математически замкнутым диффузионным приближением

кинетического уравнения для задачи о пучке электронов, падающем на мишень, в которую не требуется вводить подгоночные параметры для получения соответствия вычисленных коэффициентов обратного рассеяния, и распределений плотности выделенной энергии и, по-видимому, инжектированного заряда.

Авторы выражают глубокую благодарность разработчикам электронного архива по рассеянию электронов Физико-технического института им. А.Ф. Иоффе РАН за возможность доступа к базе данных.

Список литературы

- [1] *Смоляр В.А., Еремин А.В.* // РИЭ. 2001. № 5. С. 599–603.
- [2] *Bethe H., Rose M.E., Smith L.P.* // Proc. Amer. Phil. Soc. 1938. Vol. 78. N 4. P. 573–585.
- [3] *Капуца К., Окаюта С.* // J. Appl. Phys. 1972. Vol. 5. N 1. P. 43–58.
- [4] *Бакалейников Л.А., Конников С.Г., Погребицкий К.Ю.* и др. // ЖТФ. 1994. Т. 64. Вып. 4. С. 9–16.
- [5] *Seitzer S.M.* // Appl. Radiat. and Isotop. 1991. Vol. 42. N 10. P. 917.
- [6] *Tabata T et al.* // Radiat. Phys. Chem. 1990. Vol. 35. P. 821–825.
- [7] *Lewis H.W.* // Phys. Rev. Vol. 78. N 5. P. 526–530.
- [8] *Spencer L.V.* // Phys. Rev. 1955. Vol. 98. N 6. P. 1597–1616.
- [9] *Вятский А.А., Кабанов А.Н., Смирнов Б.Н., Трунев В.В.* // РИЭ. 1976. Т. 21. С.895–898.
- [10] Таблицы физических величин. Справочник / Под ред. И.К. Кикоина. М.: Атомиздат, 1976. 1006 с.
- [11] *Корнюшкин Ю.Д.* // ЖТФ. 1999. Т. 69. Вып. 6. С. 40–45.
- [12] *Spencer L.V.* Energy dissipation of fast electrons. Washington: National Bureau of Standards, 1959. Monograph 1.
- [13] Электронный архив: <http://www.ioffe.rssi.ru/ES>.