

Detaljna Monte Karlo simulacija transporta elektrona energija do 40 keV

Predrag Marinković, Jelena Stanković-Petrović, Miloš Vujisić i Radovan Ilić

Apstrakt—U ovom radu prikazan je model zasnovan na detaljnoj Monte Karlo simulaciji transporta elektrona niskih energija u tankim filmovima. Radi se o modifikaciji prethodnih modela te vrste i uzima u obzir sve interakcije — elastično i neelastično rasejanje i zakočno zračenje. Rezultati dobijeni ovim modelom su upoređeni sa onim dobijenim MCNP5 simulacijom i eksperimentalnim podacima. Pokazano je da se predloženi model može koristiti za praktična izračunavanja. Prednost modela demonstrirana je kroz bolje slaganje sa eksperimentalnim rezultatima koeficijenta refleksije bez značajnog uvećanja u vremenu izračunavanja u odnosu na MCNP5.

Ključne reči—Monte Karlo; elektron; transport; elastično rasejanje; neelastično rasejanje; koeficijent refleksije; koeficijent transmisijske.

I. UVOD

MONTE Karlo algoritmi za transport elektrona svrstavaju se u detaljne i kondenzovane [1]. Kod detaljnih algoritama simuliraju se sve interakcije elektrona. Ovakva simulacija se smatra egzaktom i trebalo bi da pruži isto rešenje kao transportna jednačina. Međutim, ona se može koristiti samo ako broj sudara po istoriji nije preveliki, što se dešava u tankim folijama, retkim gasovima i nanostrukturama. U čvrstim i tečnim materijalima iole značajne zapremine broj sudara je veoma veliki, pa detaljna simulacija postaje neefikasna. Stoga je većina kodova zasnovana na teoriji kondenzovanih istorija koji za ocenu ugla skretanja koriste Molierovu [2] ili Gudsmitt-Sandersonovu [3] teoriju višetrukog rasejanja. Ocena gubitka energije zasniva se na aproksimaciji kontinualnog usporavanja, a lutanje energije oko srednje vrednosti opisuje se Landauovom teorijom [4]. Mešoviti ili hibridni modeli su takođe razvijeni. Kod njih se razlikuju "tvrđi" i "meki" sudari. "Tvrđi" sudari se tretiraju jedan po jedan, a teorija višetrukog rasejanja se koristi za tretman "mekih" interakcija [5].

II. MODEL

Detaljni Monte Karlo algoritmi tretiraju sve interakcije elektrona pojedinačno, a između sudara smatra se da elektron prelazi slobodni put, slično onome što je pristup pri simulaciji transporta neutrona i fotona. Elektron gubi energiju u diskretnim interakcijama, a ne kontinualno kao kod aproksimacije

P. Marinković - Elektrotehnički fakultet, Univerzitet u Beogradu, Bulevar kralja Aleksandra 73, 11020 Beograd, Srbija (e-mail: marinkovic@etf.rs).

J. Stanković-Petrović - Institut za nuklearne nauke "Vinča", pp 522, 11001 Beograd, Srbija (e-mail: stankovicjela@gmail.com).

M. Vujisić - Elektrotehnički fakultet, Univerzitet u Beogradu, Bulevar kralja Aleksandra 73, 11020 Beograd, Srbija (e-mail: vujsa@ikomline.net).

R. Ilić - Institut za nuklearne nauke "Vinča", pp 522, 11001 Beograd, Srbija (e-mail: rasacale@gmail.com).

kontinualnog usporavanja. On trpi elastična i neelastična rasejanja, a sa malom verovatnoćom dolazi i do emisije zakočnog zračenja. Plazmorsko i fononsko rasejanje se ne uzima u obzir. Ovakav pristup koristilo je više autora [6], [7], [8], [9], [10], [11].

A. Elastično rasejanje

Po definiciji, elastično rasejanje je ono u kome je inicijalno i finalno kvantno stanje atoma, normalno osnovno, na kome je došlo do rasejanja, isto.

Model elastičnog rasejanja, koji je predložio Raderford, pretpostavlja: 1) interakcija između incidentne naelektrisane čestice i atomskog jezgra se odvija samo pod uticajem Kulonove elektrostatičke sile; 2) upadna čestica i jezgro se smatraju materijalnim tačkama; 3) mogu se zanemariti relativistički efekti; 4) posmatra se samo interakcija upadne čestice sa jednim jezgrom i 5) masa mete je mnogo veća od mase upadne čestice – elektrona. Diferencijalni poprečni presek za Raderfordovo rasejanje elektrona u inicijalnom obliku ne daje dobre rezultate, pa se stoga mora uzeti u obzir efekat zaklanjanja jezgra elektronima unutrašnjih ljuski; tako je diferencijalni poprečni presek ekranizovanog Raderfordovog rasejanja elektrona, mase m_e , na materijalu atomskog broja Z , oblika [12]

$$\frac{d\sigma_{SR}}{d\Omega} = \frac{r_e^2 Z^2}{16 \tau^2} \frac{1}{[\sin^2(\theta/2) + \eta]^2}, \quad (1)$$

gde je relativistički korigovan izraz za parametar zaklanjanja

$$\eta = \frac{\alpha^2}{4} \frac{Z^{2/3}}{\tau(\tau + 2)}. \quad (2)$$

U prethodnim izrazima $r_e = e^2/(4\pi\epsilon_0 m_e c^2) = 2.817940285 \cdot 10^{-13}$ cm je klasični radijus elektrona, $\tau = E/(m_e c^2)$ kinetička energija elektrona u jedinicama $m_e c^2$, c je brzina svetlosti, θ polarni ugao rasejanja, a $d\Omega = 2\pi \sin\theta d\theta$.

U slučaju da se uračuna relativistička korekcija, totalni presek za ekranizovano Raderfordovo rasejanje (eng. *screened Rutherford - SR*), po atomu, ima oblik

$$\sigma_{SR} = \int_{\Omega} \frac{d\sigma_{SR}}{d\Omega} d\Omega = \pi r_e^2 Z^2 \frac{1}{\eta(1 + \eta)} \left[\frac{\tau + 1}{\tau(\tau + 2)} \right]^2. \quad (3)$$

Pokazalo se da ni ekranizovano Raderfordovo elastično rasejanje ne može verno da opiše ovaj proces, pa se stoga koristi Motov izraz za diferencijalni efikasni presek koji uzima u obzir uticaj spina elektrona [13]. Zbog složenosti toga izraza, obično

je u upotrebi aproksimativni oblik Motovog diferencijalnog efikasnog preseka [14]

$$\frac{d\sigma_{Mott}}{d\Omega} = \frac{d\sigma_{SR}}{d\Omega} r(\theta), \quad (4)$$

$$r(\theta) = 1 - \beta^2 \sin^2(\theta/2) + \pi\alpha Z\beta \sin(\theta/2)[1 - \sin(\theta/2)], \quad (5)$$

gde je $\beta = v/c = \sqrt{\tau(\tau+2)/(\tau+1)^2}$, dok je $\alpha \simeq 1/137$ konstanta fine strukture. Ova formula važi samo za lake elemente za koje je $Z \leq 20$, a to ograničenje nije van primenljivosti našeg modela.

Totalni efikasni presek Motovog elastičnog rasejanja je

$$\sigma_{Mott} = \int_{\Omega} \frac{d\sigma_{Mott}}{d\Omega} d\Omega. \quad (6)$$

Predložena je empirijska formula [15], koja bi trebalo da zameni tabelarne vrednosti za Motov totalni efikasni presek i koja je korišćena u našem modelu, u obliku

$$\sigma_{Mott} = 5.1837 \cdot 10^{-21} \left(\frac{Z}{E}\right)^2 \left(\frac{E+511}{E+1024}\right)^2 \frac{4\pi c_1 (1 - e^{-c_2 \sqrt{E}})}{\eta(1+\eta)}, \quad (7)$$

gde su c_1 i c_2 korekcionni koeficijenti¹ (koji zavise od Z); energija E je u keV, a σ_{Mott} , po atomu, u cm^2 . Totalni makroskopski efikasni presek za interakciju elastičnog rasejanja u jednorodnom materijalu je

$$\Sigma_{el} = \frac{N_A}{A} \rho \sigma_{Mott}, \quad (8)$$

gde je N_A Avogadrov broj, A je atomska masa, dok je ρ gustina.

Za uzorkovanje polarnog ugla elastičnog rasejanja primenjen je metod obacivanja. Kandidovana vrednost polarnog ugla rasejanja, θ , određuje se iz

$$\int_{\phi=0}^{2\pi} \int_{\theta=0}^{\theta} \frac{d\sigma_{SR}}{d\Omega} d\Omega = \xi_1 \int_{\phi=0}^{2\pi} \int_{\theta=0}^{\pi} \frac{d\sigma_{SR}}{d\Omega} d\Omega, \quad (9)$$

odakle je, uz korišćenje izraza 1,

$$\cos \theta = 1 - \frac{2\eta\xi_1}{1 + \eta - \xi_1}, \quad (10)$$

gde je η parametar zaklanjanja, a ξ_1 slučajni broj. Nakon izbora novog slučajnog broja ξ_2 , vrši se test

$$\xi_2 \leq r(\theta)/r_{max}.$$

Ako je prethodna nejednakost zadovoljena, prihvata se kandidovana vrednost. U suprotnom se ide na ponovno kandidovanje vrednosti polarnog ugla. Analizom izraza 5 za $r(\theta)$ odabrano je da je $r_{max} \simeq 1.013$ za $Z < 20$ i $E < 40$ keV. Efikasnost algoritma zavisi od energije incidentnog elektrona i atomskog broja i za niske energije elektrona je velika.

Ugao azimuta se uzorkuje prema

$$\phi = 2\pi\xi_3, \quad (11)$$

gde je ξ_3 neki drugi slučajni broj. Smatra se da je rasejanje izotropno po azimutalnom uglu.

¹Uzeto $c_1 = 1.3$ i $c_2 = 1.32$ za Al.

Kinetička energija elastično rasejanog elektrona je ostala ista kao i incidentnog, odnosno $E' = E$. U elastičnim rasejanjima menja se samo pravac kretanja elektrona, a ne i njegova energija.

B. Neelastično rasejanje

a) Diferencijalni efikasni presek za neelastično rasejanje (eng. *inelastic scattering* - in) elektrona energije E na slobodnom elektronu (elektron-meta je slabo vezan u valentnoj ili provodnoj zoni), po jednom elektronu, može se dati u vidu aproksimacije Melerovog izraza [16]

$$\frac{d\sigma_{in,M}}{dW} = \frac{\pi e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2} \frac{1}{EW^2} = \pi r_e^2 (m_e c^2)^2 \frac{1}{EW^2}, \quad (12)$$

gde je $W = E - E'$ gubitak energije. Vidi se da je verovatniji manji nego veći gubitak energije. Ako se uvede bezdimenzionalna veličina $\epsilon = W/E$ i s obzirom na to da izjednačavanje verovatnoća daje $\frac{d\sigma_{in}}{dW} dW = \frac{d\sigma_{in}}{d\epsilon} d\epsilon$, diferencijalni efikasni presek postaje

$$\frac{d\sigma_{in,M}(\epsilon)}{d\epsilon} = \frac{\pi e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2} \frac{1}{E^2} \frac{1}{\epsilon^2} = \pi r_e^2 \frac{1}{\tau^2} \frac{1}{\epsilon^2}.$$

Totalni presek za neelastično rasejanje na spoljašnjoj ljusci, po jednom elektronu materijala mete, je

$$\sigma_{in,M}(\epsilon) = \frac{\pi e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2} \frac{1}{E^2} \frac{1 - 2\epsilon_c}{\epsilon_c} = \pi r_e^2 \frac{1}{\tau^2} \frac{1 - 2\epsilon_c}{\epsilon_c}. \quad (13)$$

gde je $\epsilon_c = W_c/E$, a W_c donja granična prenetna energija. Makroskopski efikasni presek za neelastično rasejanje na spoljašnjoj ljusci je

$$\Sigma_{in,M} = \frac{N_A}{A} \rho n_v \sigma_{in,M},$$

gde je N_A Avogadrov broj, A je atomska masa, ρ gustina, a n_v okupacioni broj spoljašnje ljuske.

Uzorkovanje slučajne promenljive ϵ moguće je inverznom transformacionom metodom prema:

- Za datu energiju incidentnog elektrona E i definisano W_c izračunati $\epsilon_c = W_c/E$;
- Izabrati slučajni broj ξ_1 ;
- Iz funkcije gustine verovatnoće $f(\epsilon) = \frac{1}{\sigma_{in}(\epsilon)} \frac{d\sigma_{in}(\epsilon)}{d\epsilon} = \frac{\epsilon_c}{1 - 2\epsilon_c} \frac{1}{\epsilon^2}$ inverznom transformacionom metodom odrediti ϵ kao

$$\epsilon = \frac{\epsilon_c}{1 - (1 - 2\epsilon_c)\xi_1};$$

- Isporučiti ϵ .

Energija rasejanog elektrona je onda

$$E' = E - W = E(1 - \epsilon).$$

Energija sekundarnog elektrona je

$$E_{SE} = W = E\epsilon,$$

S obzirom na to da se primarni i sekundarni elektron ne mogu razlikovati, po dogovoru, primarnim se nakon rasejanja proglašava onaj sa većom energijom

$$E' \leftarrow \max\{E', E_{SE}\}.$$

Onaj drugi je sekundarni, pa je $E_{SE} \leftarrow \min\{E', E_{SE}\}$. Upadni elektron rasejava se pod uglom određenim iz relacije

$$\sin^2 \theta = \frac{W}{E} = \epsilon.$$

Sekundarni elektron (izbijeni elektron) u odnosu na pravac upadnog elektrona uzmakne pod polarnim uglom

$$\cos \theta_{SE} = \sqrt{\frac{W(E + 2m_e c^2)}{E(W + 2m_e c^2)}} \simeq \sqrt{\frac{W}{E}} = \sqrt{\epsilon}.$$

b) Ako se energija veze elektrona uzima u obzir, interakcija incidentnog elektrona sa atomima može dovesti do stvaranja upražnjenih mesta u unutrašnjim ljuskama atoma. S obzirom na graničnu energiju ispod koje se čestice ne prate, moguće je da se kreiraju upražnjena mesta u K -toj, L -toj i eventualno M -toj ljusci.

Bete je 1930. godine dao formulu za totalni efikasni presek (po atomu) za neelastično rasejanje na unutrašnjim ljuskama atoma, koja je bila dosta u upotrebi, oblika [17]

$$\sigma_{in,i}(E) = \pi r_e^2 \frac{(m_e c^2)^2}{E E_{B,i}} n_i b_i \ln \frac{E}{E_{B,i}}, \quad E \geq E_{B,i}, \quad (14)$$

za $i = K, L_1, L_2, L_3$. U prethodnom izrazu E je kinetička energija incidentnog elektrona, $E_{B,i}$ je energija veze elektrona u i -toj ljusci (podljusci), n_i je okupacioni broj u toj ljusci (podljusci), dok je radijus elektrona r_e .

Parametar b_i trebalo bi shvatiti kao fit na eksperimentalne podatke i može se odrediti pomoću formula

$$b_K = 0.70 + 0.0039Z,$$

$$b_{L1} = 0.40 + 0.0018Z,$$

$$b_{L2,L3} = 0.51 + 0.0023Z,$$

gde je Z atomski broj. Makroskopski efikasni presek za neelastično rasejanje na i -toj ljusci jednorodnog materijala je

$$\Sigma_{in,M} = \frac{N_A}{A} \rho n_v \sigma_{in,M},$$

gde je N_A Avogadrov broj, A je atomska masa, ρ gustina, a n_i okupacioni broj i -te ljuske.

Simulacija gubitka energije elektrona na unutrašnjim ljuskama može se tada uraditi inverznom transformacionom metodom u skladu sa

$$\int_{E_{B,i}}^W \frac{d\sigma_{in,i}}{dW} dW = \xi_1 \int_{E_{B,i}}^E \frac{d\sigma_{in,i}}{dW} dW, \quad (15)$$

gde je ξ_1 slučajan broj. Odatle je uzorkovana vrednost gubitka energije elektrona, uz korišćenje izraza 14,

$$W = E_{B,i} \left(\frac{E}{E_{B,i}} \right)^{\xi_1}. \quad (16)$$

Energije primarnog i sekundarnog elektrona su date sa: $E' = E - W$ i $E_{SE} = W - E_{B,i}$, respektivo. Kako se oni ne mogu razlikovati, usvaja se da je

$$E' \leftarrow \max\{E', E_{SE}\}, \quad E_{SE} \leftarrow \min\{E', E_{SE}\}.$$

Polarni uglovi rasejanog i uzmaklog elektrona su: $\cos \theta \approx \sqrt{\frac{E-W}{E}}$ i $\cos \theta_{SE} \approx \sqrt{\frac{W}{E}}$, respektivo. Azimutalni ugao rasejanja incidentnog elektrona uzorkuje se sa

$$\phi = 2\pi\xi_2, \quad \text{za elektron više energije,}$$

dok je azimutalni ugao sekundarnog elektrona

$$\phi_{SE} = \phi + \pi, \quad \text{za elektron niže energije,}$$

gde je ξ_2 nov slučajan broj.

C. Zakočno zračenje

S obzirom na to da je pojava zakočnog zračenja na elementima sa malim Z malo verovatna, predloženi pristup koristi pojednostavljen model uzorkovanja energije i pravca emitovanog fotona. Funkcija gustine verovatnoće emisije fotona pod polarnim uglom ϑ u odnosu na inicijalni pravac kretanja elektrona data je sa [18]

$$p(\mu) = \frac{1 - \beta^2}{2(1 - \beta\mu)^2},$$

gde je $\beta = v/c$ i $\cos \vartheta = \mu$. Inverznom transformacionom metodom polarni ugao se uzorkuje u skladu sa

$$\cos \vartheta = \frac{2\xi_1 - 1 - \beta}{2\beta\xi_1 - 1 - \beta},$$

a azimutalni ugao $\varphi = 2\pi\xi_2$, gde su ξ_1 i ξ_2 slučajni brojevi. Energija se uzorkuje metodom odbacivanja na osnovu kandidovane vrednosti dobijne iz funkcije gustine verovatnoće

$$p(\kappa) = \frac{1}{\ln(1/\kappa_c)} \frac{1}{\kappa}, \quad \kappa \in [\kappa_c, 1],$$

u obliku $\kappa = \kappa_c^{1-\xi_3}$, gde su $\kappa = W/E$, $\kappa_c = W_c/E$, W energija izračenog fotona, a W_c donja granična energija. Kandidovane vrednosti se odbacuju ako je $\xi_4 > g(\kappa)$, gde je $g(\kappa) = \chi_{br}(\kappa)/\chi_{br,max}(\kappa)$, pri čemu je $\chi_{br}(\kappa)$ skalirani diferencijani efikasni presek za zakočno zračenje, a $\chi_{br,max}(\kappa)$ njegova maksimalna vrednost. U prethodnim izrazima ξ_1 , ξ_2 , ξ_3 i ξ_4 su slučajni brojevi.

Izračeni fotoni se ne prate, njihova energija se deponuje lokalno, a energija elektrona postaje $E' = E - W$. Smatra se da pri ovom procesu elektron ne skreće sa svog puta, iako gubi energiju.

U predloženom modelu za totalni mikroskopski efikasni presek, po atomu, za zakočno zračenje odabran je izraz (koji važi u slučaju nerelativističkih elektrona, $E \ll m_e c^2$, neekranizovano i u Bornovoj aproksimaciji) [19]

$$\sigma_{br} = \frac{16}{3} \alpha r_e^2 Z^2, \quad (17)$$

gde je r_e radijus elektrona, a α konstanta fine strukture.

D. Tok simulacije

Pretpostavlja se da elektron između interakcija slobodno putuje prešavši rastojanje

$$s = -\frac{1}{\Sigma_t} \ln(1 - \xi_1),$$

gde je ξ_1 slučajan broj, a $\Sigma_t = \Sigma_{el} + \Sigma_{in,M} + \Sigma_{in,K} + \Sigma_{in,L1} + \Sigma_{in,L2} + \Sigma_{in,L3} + \Sigma_{br} + \dots$. U svakom koraku simulacije, nakon izvlačenja slučajnog broja ξ_2 , bira se tip interakcije testiranjem:

- Ako je $0 \leq \xi_2 < \Sigma_{el}/\Sigma_t$, tada se desilo elastično rasejanje;
- Ako je $\Sigma_{el}/\Sigma_t \leq \xi_2 < (\Sigma_{el} + \Sigma_{in,M})/\Sigma_t$, tada se desilo neelastično rasejanje na slobodnom elektronu;
- Ako je $(\Sigma_{el} + \Sigma_{in,M})/\Sigma_t \leq \xi_2 < (\Sigma_{el} + \Sigma_{in,M} + \Sigma_{in,K})/\Sigma_t$, tada se desilo neelastično rasejanje na K ljusci atoma materijala;
- Ako je $(\Sigma_{el} + \Sigma_{in,M} + \Sigma_{in,K})/\Sigma_t \leq \xi_2 < (\Sigma_{el} + \Sigma_{in,M} + \Sigma_{in,K} + \Sigma_{in,L1})/\Sigma_t$, tada se desilo neelastično rasejanje na $L1$ podljusci atoma materijala;
- Ako je $(\Sigma_{el} + \Sigma_{in,M} + \Sigma_{in,K} + \Sigma_{in,L1})/\Sigma_t \leq \xi_2 < (\Sigma_{el} + \Sigma_{in,M} + \Sigma_{in,K} + \Sigma_{in,L1} + \Sigma_{in,L2})/\Sigma_t$, tada se desilo neelastično rasejanje na $L2$ podljusci atoma materijala;
- Ako je $(\Sigma_{el} + \Sigma_{in,M} + \Sigma_{in,K} + \Sigma_{in,L1} + \Sigma_{in,L2})/\Sigma_t \leq \xi_2 < (\Sigma_{el} + \Sigma_{in,M} + \Sigma_{in,K} + \Sigma_{in,L1} + \Sigma_{in,L2} + \Sigma_{in,L3})/\Sigma_t$, tada se desilo neelastično rasejanje na $L3$ podljusci atoma materijala itd.

Nakon izbora tipa interakcije određuju se polarni i azimutni ugao rasejanja za svaku od njih, a onda, nakon rasejanja, projekcije orta pravca kretanja elektrona na koordinatne ose referentnog sistema u kome se putanja elektrona prati u skladu sa

$$u' = u \cos \theta + \frac{\sin \theta}{\sqrt{1 - w^2}} [uw \cos \phi - v \sin \phi], \quad (18)$$

$$v' = v \cos \theta + \frac{\sin \theta}{\sqrt{1 - w^2}} [vw \cos \phi + u \sin \phi], \quad (19)$$

$$w' = w \cos \theta - \sqrt{1 - w^2} \sin \theta \cos \phi. \quad (20)$$

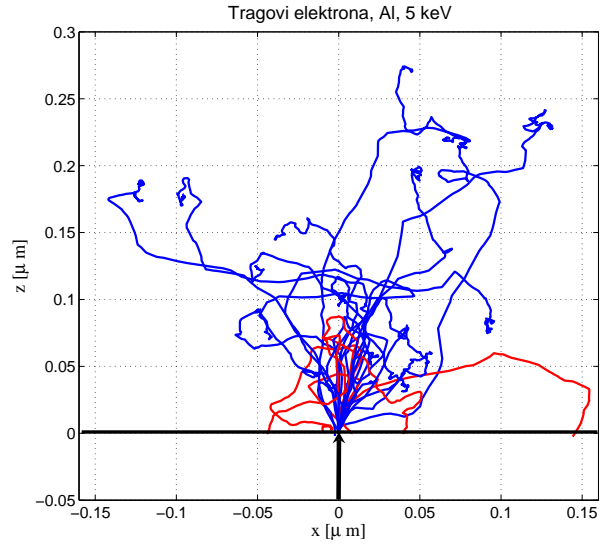
Sledi izračunavanje energije rasejanog i eventualno generisanog, u zavisnosti od interakcije koja se desila, sekundarnog elektrona.

Istorija se prekida kada energija elektrona padne ispod unapred propisane vrednosti ili ako on napusti materijal.

Svi generisani sekundarni elektroni, ako im je energija iznad unapred odabrane minimalne energije, prate se kao i primarni. Ako im je energija ispod energetskog praga, njihova energija se deponuje lokalno na mestu gde su generisani.

Fluorescentno začenje i Ožeovi elektroni, generisani u relaksacijama atoma, se ne prate. Njihova energija se deponuje lokalno na mestu gde su stvoreni.

U slučaju da se snop elektrona uputi ka materijalu i desi se da neki elektron napusti materijal kroz površinu u koju udara snop i to sa energijom ispod 50 eV, onda se on broji kao sekundarni elektron. Ako im je energija veća od 50 eV, smaraju se elektronima rasejanim unazad.



Sl. 1. Dvodimenzionalni prikaz 25 tragova elektrona energije 5 keV u Al foliji.

III. VERIFIKACIJA MODELA

Analiziran je prolaz uzanog snopa monohromatskih elektrona kroz tanku foliju od aluminijuma debljine $4,05 \mu\text{m}$. Elektroni, dolazeći iz vakuuma, perpendikularno padaju na površinu folije. Posmatrana je raspodela deponovane energije sa dubinom u foliji, koeficijent refleksije i koeficijent transmisije elektrona, sve u funkciji energije incidentnog snopa elektrona. Na osnovu predloženog modela razvijen je numerički kod SSET.FOR, napisan u programskom jeziku FORTRAN. Kod je opremljen grafičkim ulazno-izlaznim interfejsom SSET.M napisanim u programskom jeziku MATLAB i korisnički je orijentisan.

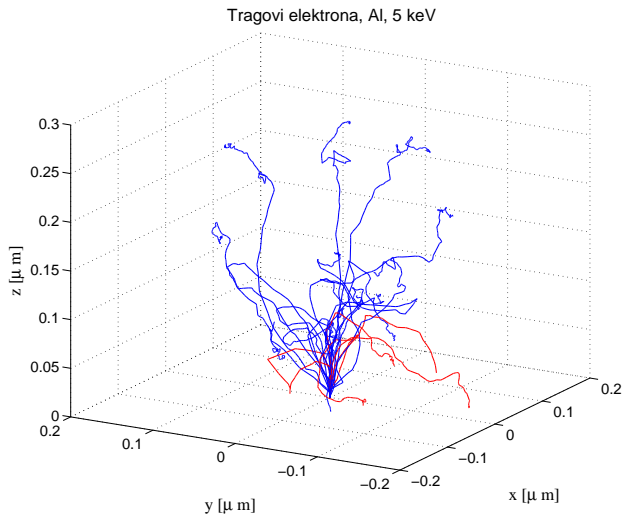
U cilju verifikacije predloženog modela, njime dobijeni rezultati upoređeni su sa rezultatima Monte Karlo simulacije programom MCNP5 [18]. Programski paket MCNP5 je Monte Karlo kod generalne namene, koji se može koristiti za transport neutrona, fotona, elektrona ili spregnuti neutronski/fotonski/elektronski transport, uključujući i mogućnost proračuna sopstvenih vrednosti kritičnih sistema. U MCNP5 paketu transport elektrona tretiran je metodom kondenzovanih istorija u aproksimaciji kontinualnog usporavanja.

Dvodimenzionalni prikaz tragova elektrona u Al foliji, na koju upada snop monoenergetskih elektrona energije 5 keV, dat je da slici 1, a na slici 2 vidi se odgovarajući trodimenzionalni prikaz. Simulacija je urađena programom SSET.

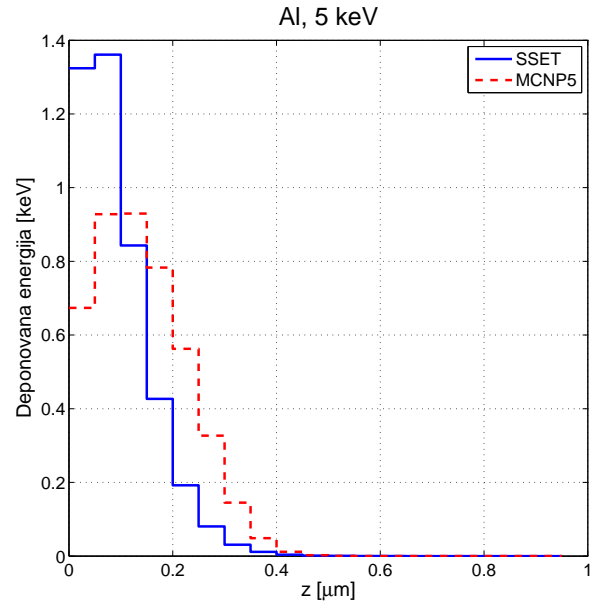
Krivudavi oblik trajektorije elektrona potvrđuje pretpostavku da će veliki zbirni polarni ugao skretanja, koji se jasno može videti na tim putanjama, omogućiti izrazitiju verovatnoću da se elektron vrati nazad i napusti foliju sa strane gde je u nju ušao.

Za energiju 5 keV akisjalno i lateralno elektroni prodiru u aluminijum da dubina reda nekoliko stotina nm. Porast energije incidentnih elektrona izaziva da elektroni prodiru do veće dubine, a i snop se lateralno više širi – slika 3.

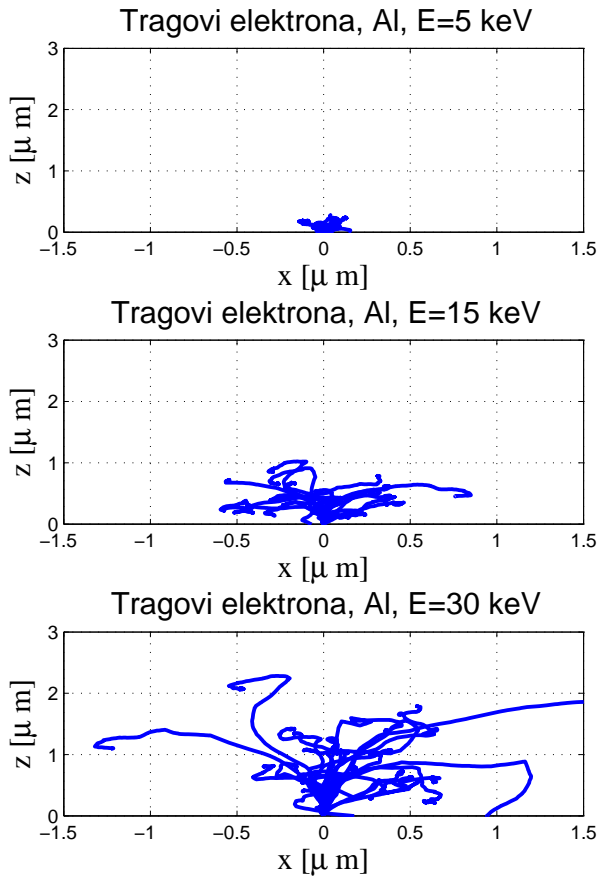
Raspodela deponovane energije sa dubinom u Al foliji data je na slikama 4 (za 5 keV), 5 (za 15 keV) i 6 (za 30 keV). De-



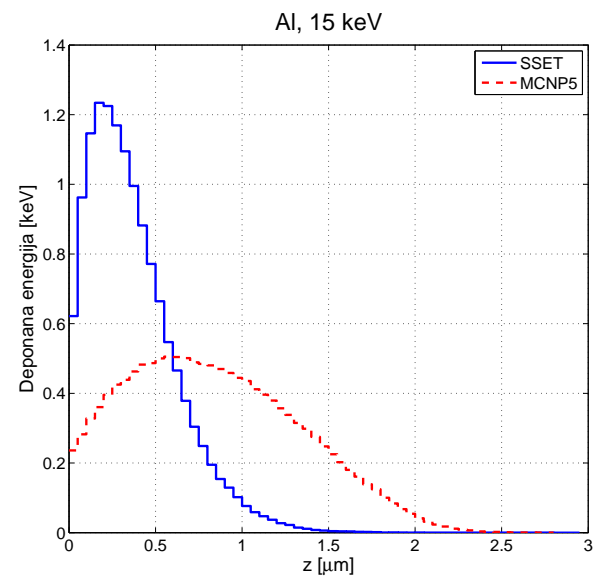
Sl. 2. Trodimenzionalni prikaz 25 tragova elektrona energije 5 keV u Al foliji.



Sl. 4. Deponovana energija.



Sl. 3. Trodimenzionalni prikaz 25 tragova elektrona energije 5 keV, 15 keV i 30 keV u Al foliji.



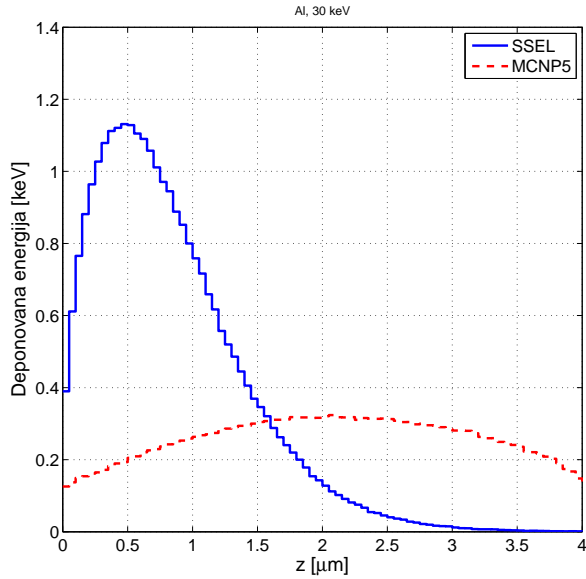
Sl. 5. Deponovana energija.

ponovana energija u slojevima folije debljine 50 nm određena je MCNP5 *f8:e brojačem. U slojevima istih debljina SSET kod takođe obezbeđuje podatke o deponovanoj energiji.

Neslaganje SSET i MCNP5 kodova je očigledno.

Objašnjenje se nalazi u tome da elektroni intenzivnije skreću nego što to predviđa Gudsmitt-Sandersenov model ugrađen u MCNP5 kod, a takvo skretanje pod velikim uglom uspešno opisuje predloženi model simulacije. Međutim, ukupna deponovana energija u foliji je skoro ista u obe simulacije, ako je debljina folije veća od dometa elektrona u njoj za datu energiju. Razlike u ukupnoj deponovanoj energiji javljaju se na energijama elektronskog snopa za koje je domet veći od debljine folije. U tabeli I data je zavisnost deponovane energije u materijalu od energije incidentnih elektrona određene programima SSET (E_{SSET}) i MCNP5 (E_{MCNP5}).

Poznavanje koeficijenta refleksije elektrona je od velikog značaja, između ostalog, u elektronskoj mikroskopiji. On se



Sl. 6. Deponovana energija.

TABELA I
UKUPNA DEPONOVALA ENERGIJA U FOLIJI OD ALUMINIJUMA.

Element	E [keV]	E_{SSET} [keV]	E_{MCNP5} [keV]
Al	5	4,28	4,41
	7,5	6,57	6,71
	10	8,91	9,01
	12,5	11,24	11,31
	15	13,62	13,67
	17,5	15,99	16,09
	20	18,37	18,52
	25	23,18	22,16
	30	27,97	20,82
	35	32,75	17,32

može odrediti na osnovu empirijskog izraza [20]

$$\eta_r = CE^m, \quad (21)$$

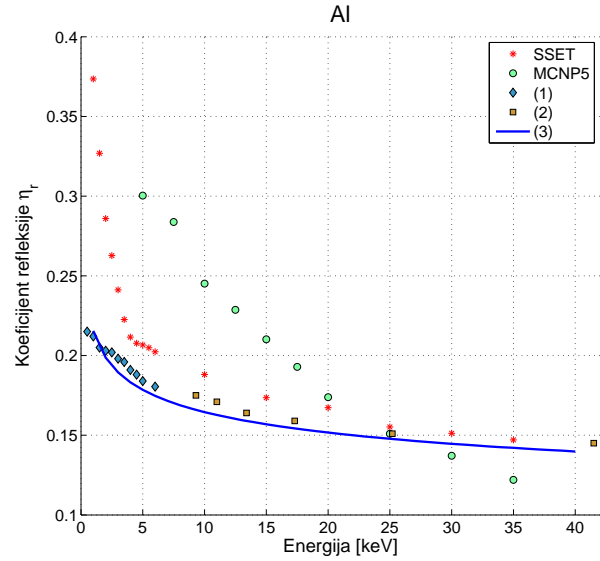
gde su

$$m = 0,1382 - 0,9211/\sqrt{Z},$$

$$C = 0,1904 - 0,2235 \ln Z + 0,1292(\ln Z)^2 - 0,01491(\ln Z)^3.$$

U prethodnim izrazima Z je atomski broj, a E energija koju je potrebno uzeti u keV. Eksplisitni eksperimentalni rezultati dati su u referencama [21] i [22].

Na slici 7 prikazana je zavisnost koeficijenta refleksije od energije incidentnih elektrona. Sa jedne strane upoređeni su rezultati proračuna programima SSET i MCNP5, a sa druge strane sa podacima iz referenci [21] i [22] i vrednosti dobijenih na osnovu izraza 21. Oko energije 25 keV očigledno je izuzetno slaganje u okvirima dela procenata oba proračuna sa referentnim eksperimentalnim podacima i vrednošću dobijene formulom 21. Međutim, kako energija opada, razlike između rezultata dobijenih MCNP5 simulacijom i referentnih podataka rase do maksimalno 67%, tako što MCNP5 simulacija precenjuje koeficijent refleksije. S druge strane, rezultati dobijeni SSET simulacijom bolje se slažu sa referentnim podacima, u okviru 22% (iznad 5 keV do 25 keV), iako i oni precenjuju η_r . Neslaganje MCNP5 proračuna prema SSET i referentnim



Sl. 7. Koeficijent refleksije η_r za foliju od Al. Proračun urađen programima SSET i MCNP5. Eksperimentalni podaci (1) su iz reference [22], podaci (2) su iz reference [21] i kriva (3) iz reference [20].

podacima raste kako energija postaje veća od 25 keV, dok se simulacije sa SSET kodom i referentni podaci u oblasti od 25 keV do 45 keV skoro sasvim slažu.

Iako predloženi model daje dobre vrednosti koeficijenta refleksije, numerički eksperimenti, koji ovde nisu prikazani, pokazuju da on ne daje prihvatljive vrednosti koeficijenta transmisije i u velikoj meri ih podcenjuje.

IV. ZAKLJUČAK

Numerički eksperimenti su pokazali da je predloženi model za simulaciju transporta elektrona kroz materijal, zasnovan na individualnim interakcijama, pogodan za primenu u oblastima elektronske mikroskopije, transporta kroz tanke filmove i nanostrukture. Za koeficijent refleksije dobijeno je odlično slaganje rezultata realizovanih predloženim modelom i eksperimentalnih rezultata. U nekim energetskim intervalima slaganje je u okviru nekoliko procenata, dok je za veoma niske energije odstupanje prema eksperimentalnim rezultatim reda 25%. Odstupanja, prema eksperimentalnim podacima, rezultata za koeficijent refleksije dobijenih MCNP5 simulacijom su daleko veća. Profili deponovane energije elektrona po slojevima u foliji, dobijeni kodovima SSET i MCNP5, značajno se razlikuju, ali ukupna deponovana energija je skoro ista. Najmanja razlika u profilima je za elektrone niskih energija i ona osetno raste sa porastom energije upadnog snopa elektrona. S obzirom na to da obim izračunavanja dozvoljava da se do rezultata dođe u okviru nekoliko minuta na uobičajenom PC računaru, metod je prihvatljiv za svakodnevnu praksu.

ZAHVALNICA

Ovaj rad je finansiran od strane Ministarstva za nauku i tehnološki razvoj Republike Srbije u okviru projekta broj 451-01-968/2010-01.

LITERATURA

- [1] R. D. Ilić, "Computational simulation of electron penetration through material by Monte Carlo techniques," 100 years since discovery of electron, Serbian Academy of Sciences and Arts, Belgrade, Serbia, Part VI, 1997.
- [2] Von Gert Molière, "Theorie der Streuung schneller geladener Teilchen II Mehrfach- und Vielfachstreuung," *Z. Naturforsch.*, vol. 3a, pp. 78-97, 1948.
- [3] S. Goudmit and J.L. Saunderson, "Multiple Scattering of Electrons," *Physical Review*, vol. 57, pp. 24-29, 1940.
- [4] L. Landau, "On the Energy Loss of Fast Particles by Ionization," *J. Phys. USSR*, vol. 8, p. 201, 1944.
- [5] F. Salvat, M.F. Fernández-Varea, E. Acosta and J. Sempau, "PENelope, A Code System for Monte Carlo Simulation of Electron and Photon Transport," *Nuclear Science Committee, Nuclear Energy Agency*, 2001.
- [6] M.K. Alam and A. Nojeh, "Monte Carlo simulation of electron scattering and secondary electron emission in individual multiwalled carbon nanotubes: A discrete-energy-loss approach," *J. Vac. Sci. Technol.*, vol. B29(4), pp. 041803-1-041803-7, Jul/Aug 2011.
- [7] K. Tókési and T. Mukoyama, "Monte Carlo Code for the Study of Electron-Solid Interactions," *Bull. Inst. Chem. Res., Kyoto Univ.*, vol.72, No. 3-4 pp. 352-360, 1994.
- [8] M.A. Shandiz, F. Salvat and R. Gauvin, "Detailed Monte Carlo Simulation of electron transport and electron energy loss spectra," *Scanning*, Vol.38, Issue 60, ISSN: 1932-8745, DOI: 10.1002/sca.21280, 2016.
- [9] D. Drouin, A.R. Couture, D. Joly, X. Tasted, V. Aimez, R. Gauvin, "CASINO V2.42A Fast and Easy-to-use Modeling Tool for Scanning Electron Microscopy and Microanalysis Users," *SCANNING*, vol. 29, pp. 92-101, 2007.
- [10] R. M. Thomson and I. Kawrakow, "On the Monte Carlo simulation of electron transport in the sub-1 keV energy range," *Medical physics*, vol. 38, p.p. 4531-4536, 2011.
- [11] D. Emefietzoglou, G. Papamichael, K. Kostereios, and M. Moscovitch, "A Monte Carlo track structure code for electrons (10 eV-10keV) and protons (0.3-10MeV) in water partitioning of energy and collision events," *Phys. Med. Biol.*, vol. 45, p.p. 3171-3194, 2000.
- [12] E. Rutherford, "The Scattering of α and β Particles by Matter and the Structure of the Atom," *Philosophical Magazine*, Ser. 6, Vol. 21, pp.669-688, 1911.
- [13] N.P. Mott, "The Scattering of Fast Electron by Atomic Nuclei," *Proc. Roy. Soc., London*, A124, p. 425, 1929.
- [14] Z. Czyzewski, D. O'Neill Mac Callum, A. Roming, and D.C. Joy, "Calculations of Mott scattering cross section," *Journal of Applied Physics*, vol. 68 p. 3066, 1990.
- [15] D. Drouin, P. Hovington and R. Gauvin, "CASINO: A new monte carlo code in C language for electron beam interactions-part II: Tabulated values of Mott crossection," *Scanning*, vol. 19(1) pp. 20-28, 1997.
- [16] C. Møller "Zur Theorie des Durchgangs schneller Elektronen durch Materie," *Ann. Physik*, vol. 14 pp. 531-585, 1932.
- [17] H. Bethe, "Zur Theorie des Durchgangs schneller Korpuskularstrahlen durch Materie," *Annalen der Physik* Vol. 397 no. 3, pp. 325-400, 1930.
- [18] *MCNP - A General Monte Carlo N-Particle Transport Code*, Version 5, X-5 Monte Carlo Team, Diagnostics Applications Group, Los Alamos National Laboratory, United States of America, 2001.
- [19] H.W. Koch and J.W. Motz, "Bremsstrahlung Cross-Section Formulas and Related Data," *REVIEWS OF MODERN PHYSICS*, Vol. 31, Number 4, October 1959
- [20] Joseph Goldstein, Dale E. Newbury, David C. Joy, Charles E. Lyman, Patrick Echlin, Eric Lifshin, Linda Sawyer and J.R. Michael, "Scanning Electron Microscopy and X-ray Microanalysis: Third Edition," *Springer US*, 2003.
- [21] Ludwig Reimer, "Scanning Electron Microscopy, Physics of Image Formation and Microanalysis," *Springer-Verlag*, ISBN 3-540-63976-4, 2nd Edition, 1998.
- [22] A.M.D. Assa'd and M.M. El Gomati, "Backscattering Coefficients for Low Energy Electrons," *Scanning Microscopy*, vol. 12(1), pp. 185-192, 1998.

ABSTRACT

Model based on a track structure Monte Carlo simulation of low-energy electron transport in thin film materials is presented. It is a modification of previous models of its kind, and it takes into account all relevant interactions elastic scattering, inelastic scattering and bremsstrahlung. Results obtained with the new model are compared to those from MCNP5 simulations, as well as to experimental data. It is demonstrated that the proposed model can be utilized for practical calculations. The model shows better agreement with experimental values of the backscatter coefficient than MCNP5, with no significant increase in computation time.

Detailed Monte Carlo simulation of electron transport for electron's energies up to 40 keV

Predrag Marinković, Jelena Stanković-Petrović, Miloš Vujisić, Radovan Ilić