

МЕТОД МОНТЕ-КАРЛО МАКРОСКОПИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ МАЛОУГЛОВОГО ОТРАЖЕНИЯ БЫСТРЫХ ЗАРЯЖЕННЫХ ЧАСТИЦ ОТ ПОВЕРХНОСТИ ТВЕРДОГО ТЕЛА

С.В. Дюльдя, М.И. Братченко

Научно-производственный комплекс

“Возобновляемые источники энергии и ресурсосберегающие технологии”

Национального научного центра “Харьковский физико-технический институт”

г. Харьков, Украина, sdul@kipt.kharkov.ua

Розроблений новий метод статистичного моделювання малокутового відбиття заряджених частинок від поверхні твердого тіла. На відміну від моделювання відбиття на мікроскопічному рівні атомних зіткнень, метод розглядає його макроскопічно як результат “укрупненого” зіткнення частинок з поверхнею. Статистичні характеристики відбиття визначаються шляхом вибірки з теоретичних кутових та енергетичних розподілів. Запропонований та протестований ефективний алгоритм вибірки, що базується на комбінації методу зворотних функцій розподілу та методу відбору. В якості прикладу застосування наведені результати статистичного моделювання ефекту посилення потоку іонів біля підніжжя вертикального конуса Венера в порівнянні з результатами простої геометричної моделі дзеркального відбиття.

Разработан новый метод статистического моделирования процесса малоуглового отражения заряженных частиц от поверхности твердого тела. В отличие от моделирования отражения на микроскопическом уровне атомных столкновений метод рассматривает его макроскопически как результат “укрупненного” столкновения частиц с поверхностью. Статистические характеристики отражения определяются путем выборки из теоретических распределений по энергии и углам. Предложен и протестирован эффективный алгоритм выборки, основанный на комбинации метода обратных функций распределения и метода отбора. В качестве примера применения приведены результаты статистического моделирования эффекта усиления потока ионов у подножия вертикального конуса Венера, которые сравниваются с результатами простой геометрической модели зеркального отражения.

A novel method of Monte Carlo simulation of small-angle reflection of charged particles from solid surfaces has been developed. Instead of atomic-scale simulation of particle-surface collisions the method treats the reflection macroscopically as “condensed history” event. Statistical parameters of reflection are sampled from the theoretical distributions upon energy and angles. An efficient sampling algorithm based on combination of inverse probability distribution function method and rejection method has been proposed and tested. As an example of application the results of statistical modeling of particles flux enhancement near the bottom of vertical Wehner cone are presented and compared with simple geometrical model of specular reflection.

ВВЕДЕНИЕ

Для получения количественных расчетных данных по характеристикам обратного рассеяния ионов и электронов широко применяется компьютерное моделирование методом Монте-Карло. Традиционные варианты этого метода являются микроскопическими в том смысле, что моделируются последовательные взаимодействия отражающихся частиц с атомами среды. Для типичных задач, когда условия падения пучка фиксированы и рассматривается однократное отражение от плоской поверхности или поверхности с рельефом атомного масштаба, микроскопический подход обеспечивает хорошую точность результатов и приемлемую эффективность.

Имеется, однако, принципиально иной класс задач, в которых расчет целевой функции моделирования требует учета: (1) последовательности коррелированных актов отражения частиц от поверхности; и/или (2) крупномасштабных отличий геометрии поверхности от регулярной атомной плоскости; и/или (3) существенного разброса потока частиц по энергиям, углам, зарядовому и массовому составу.

К таким задачам относятся, в частности, актуальные для физики высоких энергий расчеты коллиматоров, дефлекторов, ионо- и электропроводов в

условиях возможного наложения внешних электромагнитных полей. Другой пример — это моделирование (с учетом эффектов отражения) процессов ионно-лучевого и плазменного травления поверхности, когда она приобретает сложный — регулярный или квазислучайный — макроскопический рельеф.

Характерные пространственные размеры для задач этого класса являются макроскопическими. Реализациями моделируемого процесса, по существу, служат один или несколько актов отражения от локальной микроскопической области поверхности, каждый из которых характеризуется своими, изменяющимися в широких пределах и, возможно, скоррелированными начальными условиями. Это означает, что при моделировании необходимо: (i) располагать массивами исходных данных по коэффициентам отражения, угловым и энергетическим распределениям отраженных частиц в широком интервале энергий и углов падения для одного или нескольких типов налетающих частиц и (ii) обеспечить выборку значений из этих распределений для построения реализации целевой функции.

Мыслимы три пути решения задач этого класса.

Первый заключается в использовании “микроскопических” алгоритмов моделирования на атом-

ном уровне для создания низкоуровневых программных модулей расчета реализации элементарного акта отражения от локальной поверхностной плоскости. Модули верхнего уровня при этом ответственны за итеративную генерацию начальных условий и за транспорт частиц между отражениями.

В идейном плане этот путь тривиален. Он оптимален по точности и требует лишь уникального для каждой задачи программного воплощения, которое, однако, может оказаться дорогостоящим с точки зрения эффективности моделирования (особенно при высоких энергиях частиц, когда число столкновений с атомами в акте отражения велико).

Два другие решения не столь очевидны и основаны на макроскопическом моделировании каждого акта отражения от поверхности как результата “укрупненного” столкновения с ней. Второй метод состоит в накоплении библиотеки статистических данных по отражению для всевозможных энергий и углов падения с последующей выборкой путем многомерной интерполяции. Однако при этом даже для одной комбинации “частица–мишень” требуется хранение пятимерных таблиц данных для бесструктурных сред (и 6-мерных для кристаллических). Изменение этой комбинации влечет за собой пересчет таблиц с помощью программ микроскопического моделирования. Такой подход оправдывает себя лишь на ограниченном классе приоритетных задач.

Нами предлагается третий путь, основанный на использовании результатов аналитической теории отражения частиц [1]. Будучи компромиссным по точности и эффективности, он требует разработки специальных алгоритмов статистического моделирования процесса отражения частиц от поверхности, которая и является предметом настоящей работы.

НЕОБХОДИМЫЕ СВЕДЕНИЯ ИЗ ТЕОРИИ ОБРАТНОГО РАССЕЯНИЯ ЧАСТИЦ НЕУПОРЯДОЧЕННЫМИ СРЕДАМИ

Отражение частиц с энергией E_{in} от поверхности при угле падения θ_m к нормали характеризуется полным коэффициентом отражения $R(E_{in}, \theta_m)$ и дифференциальными распределениями отраженных частиц по энергии E_{out} , полярному углу вылета θ_{out} к нормали и азимутальному углу χ_{out} к плоскости падения пучка. Для скользящего падения используют также угол скольжения $\psi_m = \pi/2 - \theta_m$ и соответствующий угол вылета к поверхностной плоскости ψ_{out} .

Упомянутые выше задачи макроскопического моделирования процессов отражения неявно предполагают, что коэффициент отражения от поверхности не мал. Благоприятные условия для этого возникают для отражения при скользящем падении, когда эффективно работают механизмы многократного малоуглового рассеяния, соответствующие диффузии потока частиц в пространстве импульсов [1].

В малоугловом диффузионном приближении при учете потерь энергии в приближении непрерывного замедления и в пренебрежении их флуктуациями совместное угловое и энергетическое распределение отраженных частиц описывается выражением [1]:

$$R_{\psi\chi\Delta}(\psi, \chi, \Delta) = \frac{2\sqrt{3} \cdot \psi}{(\pi \sigma \Delta)^{3/2}} \times \exp\left[-\frac{4}{\sigma \cdot \Delta} \left(\psi^2 - \psi + 1 + \frac{\chi^2}{4}\right)\right] \cdot \operatorname{erf}\left(2 \cdot \sqrt{\frac{3 \cdot \psi}{\sigma \cdot \Delta}}\right) \quad (1)$$

где $\psi = \psi_{out}/\psi_{in}$ и $\chi = \chi_{out}/\psi_{in}$, $\Delta = (E_{in} - E_{out})/E_{in}$ — относительная потеря энергии, $\operatorname{erf}(x)$ — интеграл вероятности, а σ — так называемый параметр отражения:

$$\sigma(E_{in}, \psi_{in}) = \sigma^*(E_{in}) \cdot (1 - \cos \psi_{in})^{-1}. \quad (2)$$

Здесь σ^* — универсальный параметр рассеяния, который характеризует конкуренцию торможения и рассеяния частиц и выражается отношением их полного пробега L к так называемой транспортной длине l_{tr} :

$$\sigma^*(E_{in}) = \frac{L(E_{in})}{l_{tr}(E_{in})}; \quad l_{tr}(E) = \frac{1}{n \cdot \sigma_{tr}(E_{in})}; \quad \sigma_{tr}(E_{in}) = 2\pi \int_0^\pi (1 - \cos \theta) \cdot \frac{d\sigma_{el}(\theta | E_{in})}{d\theta} d\theta, \quad (3)$$

где σ_{tr} — транспортное сечение, определяемое дифференциальным сечением упругого рассеяния на атомах, n — атомная концентрация среды. Транспортная длина l_{tr} — это характерная длина, на которой угол отклонения частицы от первоначального направления достигает величины порядка единицы. Соответственно параметр рассеяния σ^* характеризует среднее число таких отклонений на полном пробеге частицы L , а параметр отражения σ — среднее на L число отклонений, которые приводят к отражению при заданном угле скольжения ψ_m .

С помощью замены переменной $\tau = 4/(\sigma \cdot \Delta)$ формулу (1) можно привести к виду:

$$R_{\psi\chi\tau}(\psi, \chi, \tau) = \frac{\sqrt{3} \cdot \tau \cdot \psi}{4\pi^{3/2}} \times \exp\left[-\left(\psi^2 - \psi + 1 + \frac{\chi^2}{4}\right) \cdot \tau\right] \cdot \operatorname{erf}\left(\sqrt{3 \cdot \psi \cdot \tau}\right), \quad (4)$$

где $\tau \in [4/\sigma, +\infty)$. Отсюда сразу следует, что полный коэффициент R_1 малоуглового диффузионного отражения зависит лишь от параметра отражения σ :

$$R_1(\sigma) = \int_{\psi_m}^{+\infty} d\tau \int_{-\infty}^{+\infty} d\chi \int_0^{+\infty} d\psi R_{\psi\chi\tau}(\psi, \chi, \tau), \quad (5)$$

а не от E_{in} и ψ_m по отдельности. В формуле (5) можно положить $\psi \in [0, +\infty)$ и $\chi \in (-\infty, +\infty)$ в силу быстрого затухания экспоненты с ростом ψ и $|\chi|$.

Подробный качественный анализ механизмов отражения при различных σ^* и σ можно найти в монографии [1] и цитированной там литературе. Здесь мы сосредоточим внимание на возможности использования выражений (1) и (4) при моделировании акта отражения частиц методом Монте-Карло.

ПОСТРОЕНИЕ МЕТОДА МОНТЕ-КАРЛО

Разделение переменных. Выборка значений $\{\psi, \chi, \Delta\}$ (или $\{\psi, \chi, \tau\}$) из распределений (1) или (4)

осложняется тем, что эти угловые и энергетические переменные не являются независимыми (плотности распределения не факторизуются).

С помощью замены переменных

$$x = \psi \cdot \tau; \quad y = \chi \cdot \sqrt{\frac{\tau}{2}}; \quad z = (\psi - 1) \cdot \sqrt{2} \cdot \tau \quad (6)$$

достигается частичная факторизация функции (4):

$$R_{xyz}(x, y, z) = \frac{3}{\sqrt{2\pi}} \cdot N_{01}(y) \cdot N_{01}(z) \cdot Q(x) \cdot G(z, x), \quad (7)$$

где
$$N_{01}(u) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{u^2}{2}}; \quad \int_{-\infty}^{+\infty} N_{01}(u) du = 1 \quad (8)$$

есть стандартная плотность нормального распределения с нулевым средним и единичной дисперсией,

$$Q(x) = \frac{2}{\sqrt{3}} e^{-x} \cdot \operatorname{erf}(\sqrt{3x}); \quad \int_0^{+\infty} Q(x) dx = 1 \quad (9,10)$$

$$G(z, x) = \left\{ \left(\sqrt{z^2 + 8x} - z \right) \cdot \left[1 - \frac{z}{8x} \cdot \left(\sqrt{z^2 + 8x} - z \right) \right] \right\}^{-1}.$$

Таким образом, удается добиться отделения переменной $y \in (-\infty, +\infty)$. Область изменения остающихся скоррелированными переменных x и z изображена на рис. 1.

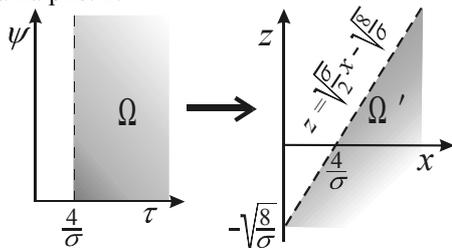


Рис. 1. Области изменения переменных при преобразовании $\{\tau, \psi\} \rightarrow \{x, z\}$

Докажем, что при $\forall \{z, x\} \in \Omega'$ функция $G(z, x)$ ограничена. Действительно, в переменных ψ и τ

$$G[z(\psi, \tau), x(\psi, \tau)] = \frac{\psi}{(\psi + 1) \cdot \sqrt{2\tau}}. \quad (11)$$

Отсюда легко видеть, что с учетом области изменения переменных ψ и τ (см. формулы (4)–(5)) $\min G = 0$ при $\psi = 0$, а $\max G = \sqrt{\sigma/8}$ при $\psi \rightarrow +\infty$ и $\tau = (4/\sigma)$.

Метод отбора. Для выборки $\{X, Y, Z\}$ из распределения (7) построим метод отбора в расширенном пространстве переменных. Вследствие ограниченности $G(z, x)$ на Ω' можно дополнить $\{x, y, z\}$ переменной t , равномерно распределенной в $[0, G(z, x)]$, так, чтобы совместное распределение $\{x, y, z, t\}$ имело вид:

$$\mathfrak{R}(x, y, z, t) = \frac{3}{\sqrt{2\pi}} N_{01}(y) \cdot N_{01}(z) \cdot Q(x). \quad (12)$$

Распределение $\mathfrak{R}(x, y, z, t)$ определено на области $V: \{z, x\} \subset \Omega', y \in (-\infty, +\infty)$ и $t \in [0, G(z, x)]$ так, что

$$R_{xyz}(x, y, z) = \int_0^{G(z, x)} \mathfrak{R}(x, y, z, t) dt. \quad (13)$$

Расширим область определения $\mathfrak{R}(x, y, z, t)$ до области $V': x \in [0, +\infty), y \in (-\infty, +\infty), z \in (-\infty, +\infty)$ и $t \in [0, (\max G = \sqrt{\sigma/8})]$. В этой области распределение $\mathfrak{R}(x, y, z, t)$ полностью факторизуется, что делает выборку значений $\{X', Y', Z', T'\}$ из него тривиальной: T' выбирается из равномерного распределения на $[0, \sqrt{\sigma/8}]$, Y' и Z' — из нормального распределения (8). Для выборки X' можно использовать метод обратных функций [2] с помощью интегральной функции распределения величины X' :

$$F_Q(x) = \int_0^x Q(u) du = \operatorname{erf}(2\sqrt{x}) - Q(x). \quad (14)$$

Окончательно предлагаемый метод отбора можно сформулировать следующим образом: подмножество $\{X', Y', Z'\}$ выборки $\{X', Y', Z', T'\}$ из распределения $\mathfrak{R}(x, y, z, t)$ на расширенной области определения V' является выборкой $\{X, Y, Z\}$ из распределения (7), если одновременно выполняются условия:

$$\begin{cases} Z' \leq \left(\sqrt{\frac{\sigma}{2}} \cdot X' - \sqrt{\frac{8}{\sigma}} \right) \\ T' \leq G(Z', X') \end{cases} \quad (15)$$

Действительно, неравенства (15) отвечают условиям попадания случайной точки $\{X', Y', Z', T'\}$ из V' в область определения V функции (12), которая, как следует из (13), содержит требуемые значения $\{X, Y, Z\}$ выборки из распределения (7).

При одновременном выполнении условий (15) реализация $\{\psi, \chi, \Delta\}$ угловых и энергетической переменных легко рассчитывается по формулам:

$$\begin{cases} \psi = 1 + \frac{Z}{4X} \left(Z + \sqrt{Z^2 + 8X} \right); \\ \chi = Y \cdot \sqrt{\frac{2\psi}{X}}; \quad \Delta = \frac{4 \cdot \psi}{\sigma \cdot X} \end{cases} \quad (16)$$

Эффективность метода отбора P есть вероятность одновременного выполнения условий (15) для случайной точки $\{X', Y', Z', T'\} \in V'$. Нетрудно показать, что она выражается отношением:

$$P(\sigma) = \frac{\int_0^{+\infty} dx dz \int_{-\infty}^{+\infty} dy \int_0^{G(z, x)} dt \mathfrak{R}(x, y, z, t)}{\int_0^{+\infty} dx \int_{-\infty}^{+\infty} dz \int_{-\infty}^{+\infty} dy \int_0^{\sqrt{\sigma/8}} dt \mathfrak{R}(x, y, z, t)}. \quad (17)$$

Интеграл в числителе по определениям (12)–(13) и (5) равен полному коэффициенту R_1 малоуглового диффузионного отражения. Интеграл от (12) в знаменателе легко вычисляется и равен $\frac{3}{4} \cdot \sqrt{\sigma/8}$. Отсюда для эффективности $P(\sigma)$ получаем (рис. 2):

$$P(\sigma) = \frac{4\sqrt{\pi}}{3} \cdot \frac{R_1(\sigma)}{\sqrt{\sigma}}. \quad (18)$$

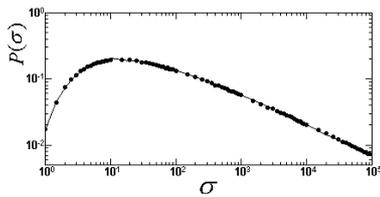


Рис. 2. Зависимость эффективности метода Монте-Карло от величины параметра отражения σ . Кривая — расчет по формуле (18); маркеры — результат тестового расчета по алгоритму рис. 3

Алгоритмическая реализация. Построенному методу Монте-Карло соответствует процедурный алгоритм (рис. 3). Выборка значения X из распределения (14) методом обратных функций может быть осуществлена путем обратной сплайн-интерполяции таблицы значений гладкой функции $F_Q(x)$.

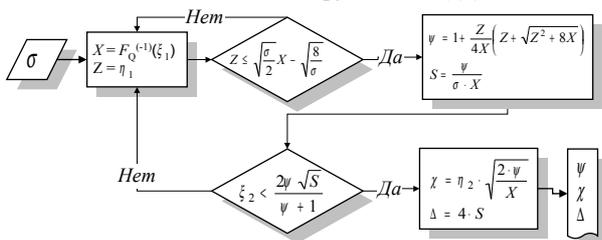


Рис. 3. Блок-схема алгоритма генерации выборки переменных $\{\psi, \chi, \Delta\}$ из распределения (1).

$\square_{1,2}$ — равномерно распределенные на $(0,1)$, $\square_{1,2}$ — нормально распределенные по (8) случайные числа

Тестирование алгоритма. На рис. 4,а,б представлены результаты розыгрыша полярных угловых распределений и энергетических спектров отраженных частиц в сравнении с результатами теоретических расчетов диффузионной модели отражения [1] при различных значениях параметра рассеяния σ^* и углах скольжения ψ_{in} . Как видно, качество алгоритма выборки более чем удовлетворительно.

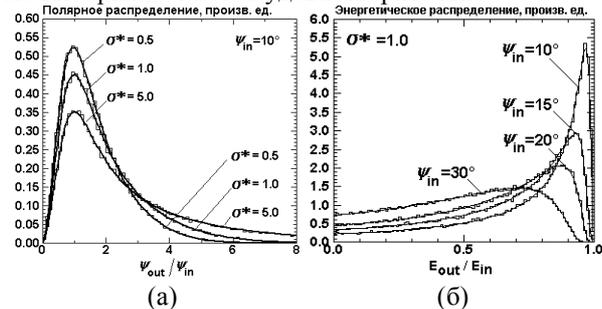


Рис. 4. Сравнение полярных угловых распределений (а) и энергетических спектров (б), разыгранных с помощью разработанного метода Монте-Карло с теоретическими распределениями

ПРИМЕР ПРИМЕНЕНИЯ: ПЕРЕРАСПРЕДЕЛЕНИЕ ПОТОКА ИОНОВ У ПОДНОЖИЯ КОНУСА ВЕНЕРА

В качестве примера практического применения разработанного метода Монте-Карло рассмотрим вторичный эффект ионного травления поверхности, заключающийся в увеличении скорости распыления в окрестности основания конусов, стенок канавок и т.д. вследствие скользящего отражения от поверхно-

сти макроскопических элементов рельефа [3]. Представляет интерес вопрос, насколько статистический характер процесса отражения влияет на этот эффект.

Нами моделировались три механизма отражения ионов от поверхности конуса — зеркальное (*specular*), диффузионное (в соответствии с распределением (1) для средних и больших значений параметра рассеяния σ^*) и изотропное. Распределения потока ионов у основания конуса Венера с углом полураствора $\gamma = 15^\circ$, нормированные на поток, приходящийся на единицу площади подстилающей поверхности, представлены на рис. 5.

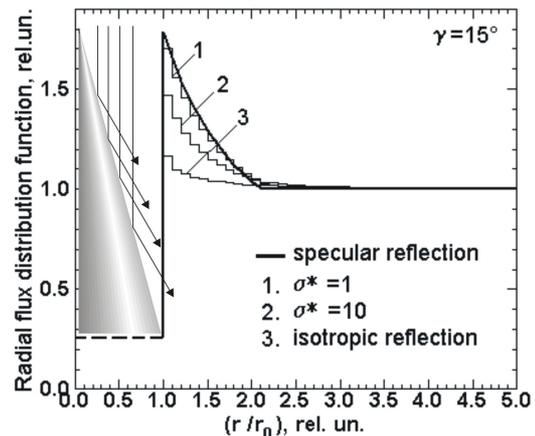


Рис. 5. Нормированные радиальные распределения потока ионов у основания конуса Венера при различных моделях отражения

Как видно из рис. 5, заметное усиление потока наблюдается на расстояниях до 2...3 радиусов r_0 основания конуса. При параметрах рассеяния $\sigma^* \sim 1$ (характерных для типичных агентов ионного травления) перераспределение потока ионов острыми конусами весьма хорошо описывается моделью зеркального отражения. При больших параметрах рассеяния, характерных для легких ионов низких энергий, отклонения от модели зеркального отражения становятся существенными. Причина этого очевидна из анализа поведения угловых распределений на рис. 4,а с ростом параметра σ^* .

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Разработанный метод Монте-Карло может найти множество применений в задачах ионной и электронной оптики, физики распыления и рассеяния заряженных частиц поверхностью твердого тела.

По существу, он обобщает известный в геометрической оптике подход к расчету систем с многократными отражениями методом Монте-Карло на случай заряженных частиц, характеризующихся значительно более сложными, нежели оптические, закономерностями отражения.

Более адекватный учет этих закономерностей составляет предмет дальнейшего развития метода. Так, представляется важным выход за рамки малоуглового диффузионного приближения (1), учет вкладов однократного резерфордского и диффузного рассеяния, флуктуаций энергетических потерь.

Представляет интерес и повышение вычислительной эффективности метода в области больших

значений параметра отражения σ .

ЛИТЕРАТУРА

1. М.И. Рязанов, И.С. Тилинин. *Исследование поверхности по обратному рассеянию частиц*. М.: “Энергоатомиздат”, 1985, 152 с.
2. И.М. Соболев. *Численные методы Монте-Карло*. М.: “Наука”, 1973, 312 с.
3. R. Smith, M.A. Tagg. An algorithm to calculate secondary sputtering by the reflection of ions in two dimensions // *Vacuum*. 1986, v. **36**, No 5, p. 285-288.