

Разработка вычислительной системы для расчёта торможения электронов в веществе

В.А. Астапенко, В.В. Березовский, П.Л. Меньшиков, Л.И. Меньшиков

Московский физико-технический институт, Долгопрудный

Поморский государственный университет им. М.В.Ломоносова, Архангельск

Введение

Вторичные электроны и рентгеновское излучение, возникающие при торможении в веществе нерелятивистских электронных пучков с энергией $E_0 \sim 10-100$ КэВ, дают важную информацию о строении вещества [1,2]. Для расчёта характеристик этих процессов необходимо знать вероятность $dW = f(\mathbf{V}, \mathbf{r}, t) d^3r d^3V$ нахождения электронов в элементе пространственного объёма d^3r , объёма d^3V в пространстве скоростей $\mathbf{V}$ электронов по истечении времени t после их входа в вещество. В данной работе обсуждаются детали построения программно-аппаратного комплекса для расчета основных физических процессов, определяющих функцию распределения тормозящихся электронов $f(\mathbf{V}, \mathbf{r}, t)$, используя метод Монте-Карло.

Основные физические эффекты

При рассматриваемых здесь энергиях $E_0 \sim 10-100$ КэВ электроны пучка легко, практически без отклонений, пронизывают электронные оболочки атомов вещества. Энергия электронов пучка намного превосходит энергию связи электронов в атомах, поэтому электроны вещества можно считать свободными. При таких условиях вещество практически аналогично плазме, поэтому воспользуемся известными фактами из теории плазмы (см., например, [3]), которые положим в основу данной работы.

Функцию распределения определяют три основных физических эффекта. Первый эффект - это плавное диффузионное изменение направления скорости электронов при рассеянии на ядрах, когда из-за дальнего действия кулоновского взаимодействия поворот направления скорости движущейся в плазме частицы происходит главным образом в результате отдельных актов рассеяния её на частицах вещества на малые углы. Для вероятности отклонения за временной интервал $(0, t)$ на угол χ из интервала $(\chi, \chi + d\chi)$ можно получить [4] выражение

$$dW(\chi) = \frac{2}{\chi^2} \exp\left(-\frac{\chi^2}{\overline{\chi^2}}\right) \chi d\chi, \quad \overline{\chi^2} = 4D_\theta \cdot \Delta t, \quad (1)$$

где D_θ - коэффициент диффузии по углам.

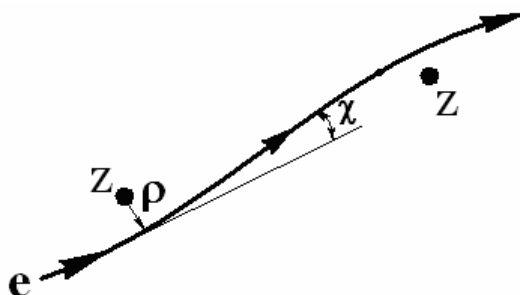


Рисунок 1. Изменение направления скорости электронов при рассеянии.

Вторым эффектом является плавное торможение электронов в результате ионизации и возбуждения электронных оболочек, которые происходят главным образом в столкновениях с большими прицельными параметрами. В каждом таком процессе бы-

стрый электрон теряет энергию порядка $I_0 \sim 10 \text{ эВ}$. Эти потери создают тормозящую его силу, фактически – силу трения Бёте [5]:

$$\mathbf{F} = -\frac{4\pi n_A Z e^4 \Lambda}{m V^2} \hat{\mathbf{V}}, \quad \hat{\mathbf{V}} = \mathbf{V} / V, \quad \Lambda = \ln \left(\frac{2mV^2}{I_0 Z} \right) \approx 6$$

Последний учитываемый эффект – резкое уменьшение энергии электронов пучка при близких столкновениях с электронами вещества. В столкновениях с ядрами энергия электрона практически не меняется. А в столкновениях с электронами вещества («е-е-рассеяние»), которые можно считать свободно движущимися и до столкновения покоящимися, е-е-взаимодействие помимо рассмотренного выше второго эффекта вызывает эффект три: диффузию электронов по шкале энергий, которая приводит к уширению начального узкого распределения по энергиям.

Дифференциальное сечение рассеяния быстрого электрона на покоящемся и его потери энергии равны:

$$d\sigma = 2\pi a^2 \frac{\sin \chi d\chi}{\cos^3 \chi}, \quad \Delta E = E \sin^2 \chi,$$

которыми полностью определён результат взаимодействия электронов и которые выводятся как из классической, так и из квантовой механики[4]. Здесь $a = e^2/E \sim 0.001 \text{ а.е.}$ – «кулоновская длина», $E = mV^2/2$, m – масса электрона, e – элементарный заряд, Z – атомный номер ядра, χ – угол между текущим ($\mathbf{V}'$) и начальным ($\mathbf{V}$) векторами скорости электрона.

Применение метода Монте-Карло

для расчёта торможения электронов в веществе

Пошаговый по времени расчёт параметров тормозящегося электрона заключается в следующем. При $t = 0$ пробный электрон со скоростью $\mathbf{V}_0 = (0, 0, V_0)$ входит в вещество (Рис.2) в начале фиксированной системы координат (x, y, z) параллельно оси z (эту систему координат будем называть опорной, ОСК). Выбираем шаг по времени Δt , вообще говоря, зависящий от энергии, например,

$$\Delta t = \frac{1}{10} t_\theta(V), \quad t_\theta(V) = \frac{m^2 V^3}{8\pi n_A Z^2 e^4 \Lambda_\theta(V)}$$

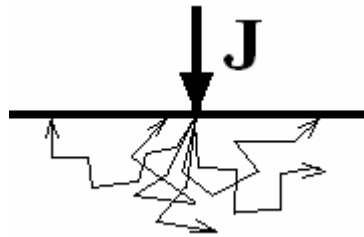


Рисунок 2. Траектории электронов в веществе.

Чтобы избежать отрицательных значений, здесь и, далее, принята замена

$$\Lambda_\theta \rightarrow \Lambda_\theta(V) = \ln \left(\frac{mV^2}{Z^{4/3} I_0} + 1 \right)$$

Текущее состояние электрона задаётся шестью числами

$$(t, \mathbf{V}, \mathbf{r}) = (t, V_x, V_y, V_z, x, y, z),$$

где все проекции относятся к ОСК. Начальное состояние:

$$(0, 0, 0, V_0, 0, 0, 0).$$

Зная текущее состояние, найдём состояние на следующем шаге:

$$(t, \mathbf{V}, \mathbf{r}) \rightarrow (t+\Delta t, \mathbf{V}', \mathbf{r}')$$

Компоненты скорости удобно записывать через сферические углы (θ, φ) , отсчитанные от осей ОСК (см. рис.3):

$$V_x = V \sin \theta \cos \varphi, \quad V_y = V \sin \theta \sin \varphi, \quad V_z = V \cos \theta$$

По истечении времени Δt , траектория электрона будет зависеть от того, какие эффекты определили дальнейшее его движение. Назовем «сильным» взаимодействием электронов (СВЭ) столкновение их с прицельным параметром $\rho < R \approx 3a$. Вероятность осуществления СВЭ за время Δt определяется[4]:

$$P = 1 - \exp(-\pi R^2 n_A Z V \Delta t)$$

Разыгрываем очередное случайное число ξ . Если выпало $\xi < P$, то СВЭ произошло, если выпало $P < \xi < 1$, то не произошло. В последнем случае параметры частицы находятся по формулам «плавного» движения, приведённым в конце раздела. Если же СВЭ произошло, находим прицельный параметр столкновения по формуле $\rho = R \sqrt{\xi_2}$,

откуда можно вычислить полярный угол отклонения: $\tan \chi = \frac{a}{\rho}$.

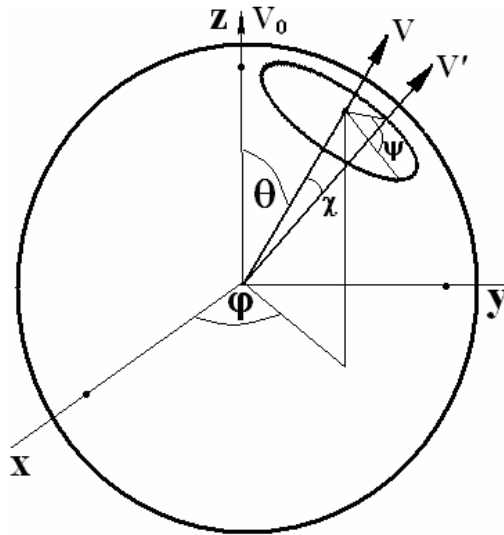


Рисунок 3. Пояснение к способу розыгрыша нового направления скорости $\mathbf{V}'$, возникающего в результате диффузии по направлениям.

Далее найдем $\psi = 2\pi \cdot \xi_3$ - азимутальный угол в плоскости столкновений, и изменение скорости в результате столкновения

$$V' = V \cdot \sqrt{1 - \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{mV^2 \rho}{2e^2}}}}$$

Здесь ξ_2 и ξ_3 – случайные величины из интервала (0,1)

В случае, когда СВЭ не произошло, в результате действия первого эффекта изменяется направление скорости электрона. Новое её направление относительно прежнего опять задаётся двумя углами: полярным χ и азимутальным ψ . Азимутальный угол равномерен в интервале $(0, 2\pi)$, поэтому рассчитывается по формуле $\psi = 2\pi \cdot \xi$. Его удобно отмерять от плоскости, проходящей через вектор $\mathbf{V}$ и $\mathbf{V}_0$. Согласно формуле (1), для угла χ находим:

$$\xi(\chi) = 1 - \exp\left(-\frac{\chi^2}{\chi^2}\right), \quad \chi = \sqrt{\chi^2 \ln\left(\frac{1}{1-\xi}\right)},$$

где ξ – случайное число в интервале (0,1). Далее необходимо найти изменение модуля скорости под действием второго эффекта: $V' = V - \frac{F}{m} \cdot \Delta t$. Получив направление скорости, новые координаты электрона вычисляются из выражения: $\mathbf{r}' = \mathbf{r} + \mathbf{V} \cdot \Delta t$.

Целью работы является расчет функции распределения электронов $f(V, \mathbf{r})$ соответствующей облучению вещества стационарным пучком (Рис.2). Разобьем пространство на прямоугольные области размерами порядка $l_s/10$, где l_s – длина торможения электрона, а пространство скоростей на области с размерами $V_0/10$. В результате фазовое пространство разбивается на области, которые будем нумеровать индексом a , и будем называть состоянием электрона. Для расчета стационарной функции распределения f_a проследим переходы из состояния в состояние каждого из большого числа пробных электронов, для чего по методу Монте-Карло разыгрываем серию переходов пробных электронов из состояния в состояние до тех пор, пока в результате торможения он не остановится. Здесь критерием остановки можно считать потерю энергии до величины $\sim 1 \text{ КэВ}$.

Организация параллельных вычислений

Эффективность распараллеливания при решении подобных задач обычно достаточно высока, в связи с тем отдельные розыгрыши по методу Монте-Карло не зависят друг от друга по данным, и во многом определяется способом редукции полученных результатов от вычислительных узлов. Декомпозиция задачи на вычислительные потоки в определенной степени тривиальна, и заключается в простом выделении отдельного потока под каждый розыгрыш. Распределение потоков на вычислительные узлы зависит от необходимости балансировки нагрузки и, в описываемой здесь системе, состоящей из однородных вычислительных узлов, равномерное. Редукция результатов вычислений ввиду аддитивности ее характера (в данном случае необходимо просто просуммировать содержимое соответствующих ячеек фазовых пространств находящихся на всех узлах) выстраивается по схеме бинарного дерева.

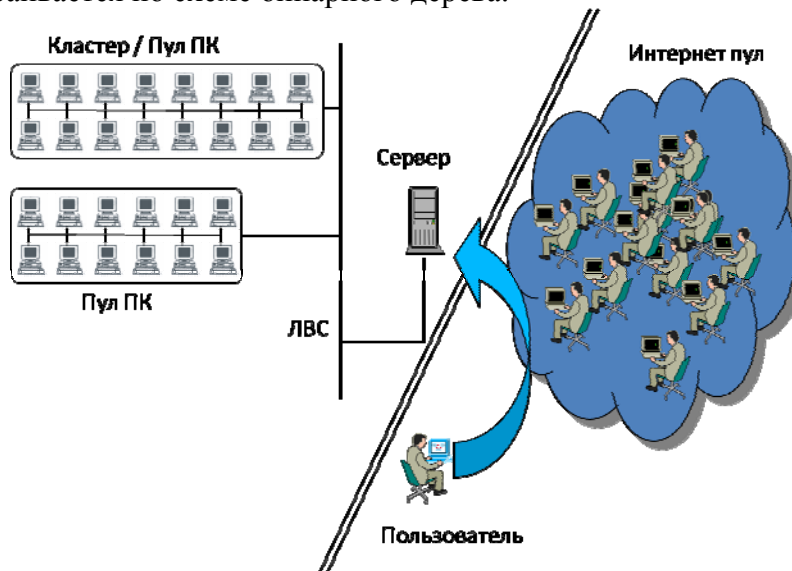


Рисунок 4. Структура вычислительной системы.

В качестве приложения подобной схемы вычислений в докладе показывается способ создания web-ориентированной системы предоставляющей интерфейс для постановки задачи и визуализации результатов вычислений (Рис.4). В этом случае можно

выделить две основные ступени вычислений, расчет динамики и процесс визуализации, каждая из них реализуется на отдельных системах. Динамика реализуется на GRID системе включающей в себя 16 2-ядерных машин. Процесс визуализации накапливаемых данных реализован на фронтальном 2-х процессорном 4-ядерном узле, Процесс синхронизации данных в данном случае является односторонним: от потока динамики к визуализации. Визуализация результатов происходит по запросу удаленного пользователя по мере накопления результатов вычислений. Основное распараллеливание осуществляется внутри потока расчета динамики: здесь эксплуатируется параллелизм по данным – в данном случае это зерно для генератора случайных чисел и, соответственно, узлы GRID системы разбирают блоки данных для обработки и выполняют идентичные операции с ними. Число частиц варьируется от 10^8 до 10^9 . Временные затраты в данном случае меняются в зависимости от числа используемых процессоров практически линейно.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки РФ в рамках программы "Развитие научного потенциала высшей школы" (проект 2.1.1/2637).

Литература

1. Дж.Гоулдстейн и др. – Растровая электронная микроскопия и рентгеновский микроанализ.
2. В.А.Астапенко, Л.А.Буреева, В.С.Лисица, УФН, **172**, 155(2002)
3. Б.А.Трубников, Теория плазмы. Москва. Наука.
4. В.А.Астапенко, В.В.Березовский, П.Л.Меньшиков, Л.И.Меньшиков Подходы к разработке быстрого кода Монте-Карло для расчёта торможения электронов в веществе. Труды МФТИ. вып. 2.
5. Л.Д.Ландау, Е.М.Лифшиц, Квантовая механика. Москва. Наука.