



УДК 539.186

ELASTIC AND TRANSPORT ELEMENTARY INTERACTION CROSS-SECTIONS FOR OCTAHEDRAL SYMMETRY MOLECULES
ПРУЖНИЙ І ТРАНСПОРТНИЙ ПЕРЕРІЗИ ЕЛЕМЕНТАРНОЇ ВЗАЄМОДІЇ ДЛЯ
МОЛЕКУЛ ОКТАЕДРИЧНОЇ СИМЕТРІЇ

Kravchenko Yu.S. / Кравченко Ю.С.

c.ph.-m.s., prof. / к.ф.-м.н., проф.

Seletskya O.O. / Селецька О.О.

c.t.s., as.prof. / к.т.н., доц.

Vinnitsa National Technical University,

Vinnitsa, Khmel'nyts'ke Hwy, 95, 21021

Вінницький національний технічний університет,

Вінниця, вул.Хмельницьке шосе, 95, 21021

Анотація. Наведені результати аналітичного розрахунку пружного та транспортного перерізів елементарної взаємодії для молекул октаедричної симетрії. Використана математична модель, в якій багатоелектронна задача замінюється одноелектронною шляхом використання ефективного потенціалу, а саме, системи потенціалів нульового радіусу.

Ключові слова: нерівноважна плазма, молекули октаедричної симетрії, елементарна взаємодія

Вступ

Нерівноважна галогенвміщуюча плазма широко використовується в сучасній мікро- та нанотехнології для формування функціонального рисунку майбутньої мікросхеми шляхом плазмового травлення мікроструктур. Дослідження кінетики та механізмів фізико-хімічних процесів, що протікають в такій плазмі неможливе без знання всіх перерізів елементарної взаємодії основної молекули плазмоутворювального газу, а використання методики [1] ускладнюється внаслідок практично повної відсутності будь-яких експериментальних даних щодо складних молекул, і зокрема, октаедричної симетрії типу SF₆, які на даний час є одними із основних компонентів для плазмоутворювальних газів. Мета даної роботи – розробка математичної моделі, яка повинна описувати пружне розсіювання та процеси збудження молекул октаедричної симетрії.

Основні результати досліджень

На відміну від тетраедра, вираз для нормованої [2] амплітуди розсіювання електронів на центральному атомі буде мати вигляд

$$F_0 = f_0 \frac{1 - 5f \frac{e^{ika}}{a} + f \frac{e^{ikR}}{R} \sum_{i=1}^6 e^{i\vec{k}_0 R_i}}{1 - f \frac{e^{ika}}{a} - 6f_0 f \frac{e^{i2kR}}{R^2}}. \quad (1)$$

Для периферійних атомів нормована амплітуда розсіювання визначається як



$$F_j = \frac{f}{\left(1 + f \frac{e^{ika}}{a}\right) \left(1 - 5f \frac{e^{ika}}{a} - 6f_0 f \frac{e^{i2kR}}{R^2}\right)} \times \left[1 - 4f \frac{e^{ika}}{a} - 5f_0 f \frac{e^{i2kR}}{R^2} + \left(f \frac{e^{ika}}{a} + f_0 f \frac{e^{i2kR}}{R^2}\right) \sum_{\substack{i=1 \\ i \neq j}}^6 e^{i\vec{k}_0 \vec{R}_{ij}} + f_0 \frac{e^{ikR}}{R} \left(1 + f \frac{e^{ika}}{a}\right) e^{-i\vec{k}_0 \vec{R}_j}\right], \quad (2)$$

де k та k_0 – імпульси частинок, які налітають і розсіюються; f_0 та f – амплітуди розсіювання на центральному та периферійних атомах; a та R – параметри моделі молекули типу XU_6 (a – відстань між двома периферійними атомами; R – відстань від центрального до одного з периферійних атомів).

Повна амплітуда розсіювання $F(\vec{k}_0, \vec{k})$ також може бути представлена аналогічним виразом як і для тетраедричної молекули, але в даному разі в першому члені відповідного виразу необхідно коефіцієнт 3 замінити на коефіцієнт 5. Індeksi сумування тут змінюються не від 1 до 4, а від 1 до 6 і під параметром D в даному випадку слід розуміти вираз

$$D = 1 - 5f \frac{e^{ika}}{a} - 6f_0 f \frac{e^{i2kR}}{R^2}. \quad (3)$$

Виконуючи всі необхідні заміни і проводячи обчислення за аналогічною до [2] методикою, отримаємо вирази для усереднених пружного та транспортного перерізів

$$\begin{aligned} \frac{1}{4\pi} \sigma_e = S_{\vec{k}_0} S_{\vec{k}} |F(\vec{k}_0, \vec{k})|^2 &= \left| \frac{f_0}{D} \left(1 - 5f \frac{e^{ika}}{a}\right) \right|^2 + \frac{12}{R^2} \left| \frac{f_0 f}{D} \right|^2 \left[1 + 5 \frac{\sin ka}{ka} + 6 \left(\frac{\sin kR}{kR} \right)^2 \right] + \\ &+ 6 \left| \frac{f}{1 + f \frac{e^{ika}}{a}} \right|^2 \left[1 + 5 \left(\frac{\sin ka}{ka} \right)^2 \right] + 36 \left| \frac{f}{1 + f \frac{e^{ika}}{a}} \right|^2 \left| \frac{f \left(\frac{e^{ika}}{a} + f_0 \frac{e^{i2kR}}{R^2} \right)}{D} \right|^2 \left(1 + 5 \frac{\sin ka}{ka} \right)^2 + \\ &+ 24 \frac{\sin kR}{kR} \left| \frac{f_0}{D} \right| \operatorname{Re} f \left(1 - 5f^* \frac{e^{-ika}}{a} \right) \frac{e^{ikR}}{R} + 12 \left(\frac{\sin kR}{kR} \right)^2 \operatorname{Re} \frac{f_0^* f \left(1 - 5f^* \frac{e^{-ika}}{a} \right)}{\left(1 + f \frac{e^{ika}}{a} \right) D^*} + \\ &+ \frac{72}{|D|^2} \left(\frac{\sin kR}{kR} \right)^2 \operatorname{Re} f_0^* \left(1 - 5f^* \frac{e^{-ika}}{a} \right) \frac{f^2 \left(\frac{e^{ika}}{a} + f_0 \frac{e^{i2kR}}{R^2} \right)}{1 + f \frac{e^{ika}}{a}} + \\ &+ 24 \frac{\sin kR}{kR} \left(1 + 5 \frac{\sin ka}{ka} \right) |f|^2 \operatorname{Re} \frac{f_0^*}{\left(1 + f \frac{e^{ika}}{a} \right) D^*} \frac{e^{-kR}}{R} + \end{aligned}$$



$$\begin{aligned}
 &+ 144 \frac{\sin kR}{kR} \left| \frac{f}{D} \right|^2 \operatorname{Re} \frac{f_0^* f}{1 + f \frac{e^{ika}}{a}} \left(\frac{e^{ika}}{a} + f_0 \frac{e^{i2kR}}{R^2} \right) \frac{e^{-kR}}{R} + \\
 &+ 12 \left(1 + 5 \frac{\sin ka}{ka} \right)^2 \left| \frac{f_0^* f}{1 + f \frac{e^{ika}}{a}} \right|^2 \operatorname{Re} \frac{f \left(\frac{e^{ika}}{a} + f_0 \frac{e^{i2kR}}{R^2} \right)}{D}; \\
 \frac{1}{4\pi} \sigma_e = S_{\vec{k}_0} T_{\vec{k}} |F(\vec{k}_0, \vec{k})|^2 &= \left| \frac{f_0}{D} \left(1 - 5f \frac{e^{ika}}{a} \right) \right|^2 + \frac{12}{R^2} \left| \frac{f_0 f}{D} \right|^2 \left[1 + 5 \frac{\sin ka}{ka} + 6 \left(\frac{\sin kR}{kR} \right)^2 \right] + \\
 &+ 6 \left| \frac{f}{1 + f \frac{e^{ika}}{a}} \right|^2 \left[1 + 5 \left(\frac{\sin ka}{ka} \right)^2 \right] + 36 \left| \frac{f}{1 + f \frac{e^{ika}}{a}} \right|^2 \left| \frac{f \left(\frac{e^{ika}}{a} + f_0 \frac{e^{i2kR}}{R^2} \right)}{D} \right|^2 \left(1 + 5 \frac{\sin ka}{ka} \right)^2 + \\
 &+ 24 \frac{\sin kR}{kR} \left| \frac{f_0}{D} \right| \operatorname{Re} f \left(1 - 5f^* \frac{e^{-ika}}{a} \right) \frac{e^{ikR}}{R} + \\
 &+ 12 \left[\left(\frac{\sin kR}{kR} \right)^2 - \frac{1}{(kR)^2} \left(\frac{\sin kR}{kR} - \cos kR \right)^2 \right] \operatorname{Re} \left(f_0^* f \left(1 - 5f \frac{e^{-ika}}{a} \right) \right) / \left(\left(1 + f \frac{e^{ika}}{a} \right) D^* \right) + \\
 &+ \frac{72}{|D|^2} \left(\frac{\sin kR}{kR} \right)^2 \operatorname{Re} \left(f_0^* \left(1 - 5f^* \frac{e^{-ika}}{a} \right) f^2 \left(\frac{e^{ika}}{a} + f_0 \frac{e^{i2kR}}{R^2} \right) / \left(1 + f \frac{e^{ika}}{a} \right) \right) + \\
 &+ 4|f|^2 \left[6 \frac{\sin kR}{kR} \left(1 + 5 \frac{\sin ka}{ka} \right) - \left(\frac{15}{2(kR)^2} + \frac{18}{(ka)^2} \right) \times \left(\frac{\sin kR}{kR} - \cos kR \right) \left(\frac{\sin ka}{ka} - \cos ka \right) \right] \times \\
 &\times \operatorname{Re} \frac{f_0^*}{\left(1 + f \frac{e^{ika}}{a} \right) D^*} \frac{e^{-ikR}}{R} + 144 \frac{\sin kR}{kR} \left(1 + 5 \frac{\sin ka}{ka} \right) \left| \frac{f}{D} \right|^2 \operatorname{Re} \frac{f_0^* f}{1 + f \frac{e^{ika}}{a}} \left(\frac{e^{ika}}{a} + \frac{e^{i2kR}}{R^2} \right) \frac{e^{-ikR}}{R} + \\
 &+ 12 \left[\left(1 + 5 \frac{\sin ka}{ka} \right)^2 - \frac{15}{(ka)^2} \left(\frac{\sin ka}{ka} - \cos ka \right)^2 \right] \left| \frac{f}{1 + f \frac{e^{ika}}{a}} \right|^2 \operatorname{Re} \frac{f \left(\frac{e^{ika}}{a} + f_0 \frac{e^{i2kR}}{R^2} \right)}{D}.
 \end{aligned}$$

В цих формулах, на відміну від тетраедричної молекули [2], $a = \sqrt{2R}$, а знаком * позначені спряжені величини.

Дані розрахунків показані на рис. 1 та 2. На рис. 2, крім того, пунктиром зображено залежність величини транспортного перерізу від енергії електрона, яка є результатом підгонки відповідних значень за даними експерименту [3].

Оскільки модель октаедричної молекули побудована на аналогії з тетраедричною [2], то і правила відбору параметрів моделі (зворотних довжин розсіювання електронів на атомах a та a_0) аналогічні, тобто під час розрахунків перерізів враховувалось, що електрон, який налітає, відштовхується від зовнішніх атомів ($a < 0$) і притягується до центральних ($a_0 > 0$).

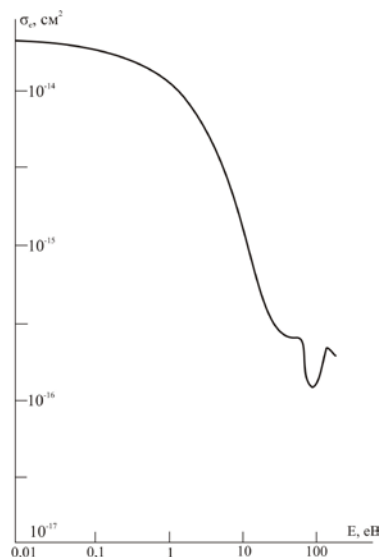


Рис. 1. Пружний переріз розсіювання електронів на молекулі SF₆ в наближенні потенціалів нульового радіуса, $\alpha = -2,14 \text{ \AA}$, $\alpha_0 = 1,65 \text{ \AA}$

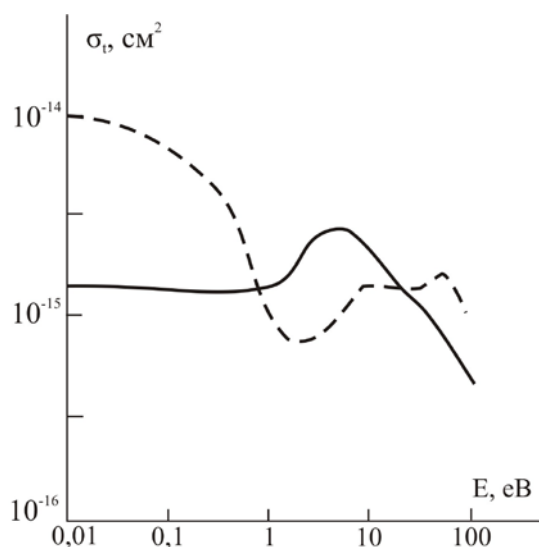


Рис. 2. Транспортний переріз розсіювання електронів на молекулі SF₆ в наближенні потенціалів нульового радіусу $\alpha = -2,14 \text{ \AA}$, $\alpha_0 = 1,65 \text{ \AA}$

Висновки

Як і для молекул тетраедричної симетрії, в даному випадку можна констатувати розумну узгодженість отриманих результатів в області від декількох до декількох десятків електрон-вольтів, що в більшості випадків цілком задовольняє дослідників молекулярної плазми, оскільки саме в цьому діапазоні енергій і відбуваються основні фізико-хімічні перетворення, що визначають їх кінетику та механізми.

Література:

1. Словецкий Д. И. Механизмы химических реакций в неравновесной плазме / Д. И. Словецкий. М.: Наука, 1980. 310 с.
2. Кравченко Ю. С., Селецька О.О. Визначення перерізів елементарної



взаємодії для молекул тетраедричної симетрії в нерівноважній плазмі /
Иновационная наука, образование, производство и транспорт: Техника и
технологии : монография / [авт.кол. : Верховлюк А.М., Иванова Т.Н. и др.]. –
Одесса: КУПРИЕНКО СВ, 2018 – 224 с. ISBN 978-617-7414-51-2

3. Словецкий Д. И. Функции распределения электронов по энергиям и
взаимодействие электронов с многоатомными фторсодержащими газами / Д. И.
Словецкий, А. А. Дерюгин // Химия плазмы. 1987. № 13. С. 240–277.

References:

1. Sloveckij D. I. (1980). *Mekhanizmy himicheskikh reakcij v neravnovesnoj plazme* [Mechanisms of chemical reactions in non-equilibrium plasma]. - Moscow: Nauka. - 310 p.

2. Kravchenko Yu. S., Selez`ka O.O. (2018). *Vy`znachennya pereriziv elementarnoyi vzayemodiyi dlya molekul tetraedry`chnoyi sy`metriyi v nerivnovazhnij plazmi* [Determination of the cross sections for the elementary interaction of molecules of tetrahedral symmetry in a nonequilibrium plasma] in *Innovacionnaya nauka, obrazovanie, proizvodstvo i transport: Tekhnika i tekhnologii* [Innovation science, education, production and transport: Engineering and technology]. – Odessa: Kuprienko SV. – 224 p.
ISBN 978-617-7414-51-2.

3. Sloveckij D. I. (1987). *Funkcii raspredeleniya elektronov po energiyam i vzaimodejstvie elektronov s mnogoatomnymi ftorsoderzhashchimi gazami* [Energy distribution functions of electrons and the interaction of electrons with polyatomic fluorinated gases] in *Himiya plazmy* [Plasma chemistry], issue 13, pp. 240-277.

Abstract. Introduction. *The study of the kinetics and mechanisms of physicochemical processes occurring in a non-equilibrium plasma is impossible without knowledge of all cross-sections of the elementary interaction of the basic plasma gas. The main results of research.* *Calculations are based on the use of a mathematical model in which the multielectron problem is replaced by a single-electron one. The effective potential, a system of zero-radius potentials centered on the cores of the atoms that makes up the molecule, was used for mathematical simulation. Conclusions.* *The results of the analytical calculation of the cross-sections for the elementary interaction of molecules with octahedral symmetry, and in particular for the SF₆ molecule are presented. It is shown that electron scattering on a molecule consists of acts of scattering on other atoms and interference of scattered waves.*

Key words: *non-equilibrium plasma, octahedral symmetry molecules, elementary interaction*

Рецензент: д.т.н., проф., Осадчук О.В.

Статья отправлена: 04.06.2019 г.

© Кравченко Ю.С.