

ЛАБОРАТОРНАЯ РАБОТА 3

Исследование динамики процессов многократного рассеяния с учетом как упругого рассеяния так и потерь энергии потока быстрых атомных частиц при транспортировке в твердотельных и газообразных мишенях

Цель работы: Изучение закономерностей многократного рассеяния атомных частиц в твердых телах и плотной плазме. Ознакомление с процессом одновременной деградации и изотропизации пучка быстрых атомных частиц при его транспортировке в различных средах. Изучение методов решения граничных задач теории переноса методами инвариантного погружения. Овладение методикой расчета энергетических спектров частиц отраженных от однородных плоскопараллельных слоёв в малоугловом квазиднократном приближении.

Теоретическое описание

Уравнение переноса атомных частиц в односкоростном приближении

В лабораторной работе 1 приведена модель рассеяния атомных частиц плоским слоем твердого тела или плотной плазмы. Показано что, рассеяние атомных частиц разделяется на: упругое и неупругое. В лабораторной работе 1 исследовано многократное упругое рассеяния а в лабораторной работе 2 – неупругое. Настоящая лабораторная работа посвящена исследованию рассеяния частиц, испытавших как упругое так и неупругое рассеяния.

Запишем уравнение переноса частиц, используя разделение сечения рассеяния на упругое и неупругое а также односкоростное приближение:

$$\begin{aligned} \mu \frac{d}{dz} N(z, \Delta, \hat{\Omega}) + n_0 (\sigma_{el} + \sigma_{in}) N(z, \Delta, \hat{\Omega}) = \\ = n_0 \int_{4\pi} N(z, \Delta, \hat{\Omega}') \omega_{el}(\hat{\Omega} \cdot \hat{\Omega}') d\Omega' + \\ + n_0 \int_0^{\Delta} N(z, \varepsilon, \hat{\Omega}) \omega_{in}(\Delta - \varepsilon) d\varepsilon. \end{aligned} \quad (1)$$

Пусть моноэнергетический, мононаправленный, широкий пучок частиц (ПМ источник) падает только на верхнюю границу слоя вещества

толщиной d . Тогда граничное условие для уравнения переноса (1) имеет вид:

$$\begin{cases} N(0, \Delta, \hat{\Omega}) = N_0 \delta(\Delta) \delta(\hat{\Omega}_0 - \hat{\Omega}), & \mu > 0, \\ N(d, \Delta, \hat{\Omega}) = 0, & \mu < 0. \end{cases} \quad (2)$$

Как и в лабораторной работе 2 сделаем преобразования Лапласа по переменной Δ :

$$\begin{aligned} \mu \frac{d}{dz} N(z, p, \hat{\Omega}) + n_0 (\sigma_{el} + \sigma_{in} (1 - x_{in}(p))) N(z, p, \hat{\Omega}) = \\ = n_0 \frac{\sigma_{el}}{4\pi} \int_{4\pi} N(z, p, \hat{\Omega}') x_{el}(\hat{\Omega} \cdot \hat{\Omega}') d\Omega'. \end{aligned} \quad (3)$$

Удобно ввести величину

$$\Lambda(p) = \frac{\sigma_{el} + \sigma_{in} (1 - x_{in}(p))}{\sigma_{el} + \sigma_{in}}. \quad (4)$$

Используя альбедо однократного рассеяния $\lambda = \frac{\sigma_{el}}{\sigma_{el} + \sigma_{in}}$, безразмерную толщину $\tau = n_0 z (\sigma_{el} + \sigma_{in})$ (см. лабораторную работу 1) и выражение (4), уравнение (3) можно записать в виде

$$\begin{aligned} \mu \frac{d}{d\tau} N(\tau, p, \hat{\Omega}) + \Lambda(p) N(\tau, p, \hat{\Omega}) = \\ = \frac{\lambda}{4\pi} \int_{4\pi} N(\tau, p, \hat{\Omega}') x_{el}(\hat{\Omega} \cdot \hat{\Omega}') d\Omega'. \end{aligned} \quad (5)$$

Функция отражения, угловое распределение отраженных частиц, коэффициент отражения

Одной из наиболее важных задачи теории переноса атомных частиц является задача нахождения плотности потока атомных частиц, отраженного от слоя вещества толщиной d . Эту плотность потока атомных частиц обычно представляют в виде:

$$N(0, \Delta, \hat{\Omega}) = N_0 R(d, \Delta, \hat{\Omega}_0, \hat{\Omega}^-) / |\mu|, \quad -1 \leq \mu < 0, \quad (6)$$

где $R(\cdot)$ - функция отражения, $\hat{\Omega}^-$ - направления в верхнюю полусферу относительно оси OZ (см. рис.3.1).

Если рассматривать атомные частицы, отразившиеся от мишени в направлении $\hat{\Omega}^-$, то плотность вероятности фиксирования этих частиц с любой энергией определяется *угловой функцией распределения отраженных частиц*:

$$\rho(d, \hat{\Omega}^-) = \int_0^{E_0} R(d, \Delta, \hat{\Omega}^-) d\Delta \quad (7)$$

Полный *коэффициент отражения* определяется через интеграл функции отражения по всем потерям энергии и всем углам отражения:

$$\rho(d, \xi) = \int_{\Omega^-} \int_0^{E_0} R(d, \Delta, \hat{\Omega}^-) d\Delta d\Omega^-, \quad (8)$$

где $\xi = \cos \theta_0$, θ_0 - угол падения, Ω^- - верхняя полусфера.

Функция отражения является решением граничной задачи уравнения переноса. Но само уравнение переноса несет избыточную информацию о поведении плотности потока в глубине среды. Поэтому лучше находить функцию отражения из уравнений, содержащих в качестве неизвестных только эту функцию. Такие уравнения известны. Это нелинейные интегральные уравнения Амбарцумяна [2].

Уравнение Амбарцумяна для функции отражения

Уравнение Амбарцумяна можно получить непосредственно из уравнения переноса, используя граничные условия, либо применяя эвристические методы теории переноса. Эвристическими называются такие методы получения решения задач, которые на основе непосредственного рассмотрения процесса рассеяния, минуя уравнение переноса, позволяют получать известные из традиционной теории или новые соотношения. При этом, поскольку решение интегро-дифференциальных или интегральных уравнений теории переноса представляется трудной задачей, эвристическими методами создатели теории переноса стремились вывести более удобные для решения уравнения или выяснить структуру решений до их вычисления. В теории переноса кроме принципа инвариантности используют такие эвристические методы как метод сложения слоев и вероятностный метод.

Приведем один из вариантов *принципа инвариантности*: если от слоя вещества, освещаемого параллельным потоком частиц, однородного по всей толщине и без внутренних источников отнять сверху слой толщиной $d\tau$, настолько тонкой, что $d\tau \ll 1$ и процессами двукратного рас-

сеяния в слое $d\tau$ можно пренебречь, и прибавить его же снизу, то отраженный и прошедший потоки частиц не изменятся.

Используя принцип инвариантности, запишем уравнение для функции отражения:

$$\begin{aligned}
 \frac{d}{d\tau} R(\tau, p, \hat{\Omega}_0, \hat{\Omega}^-) + \frac{\xi + |\mu|}{\xi |\mu|} \Lambda(p) R(\tau, p, \hat{\Omega}_0, \hat{\Omega}^-) = \\
 = \overbrace{\frac{\lambda}{4} x_{el}(\hat{\Omega}_0 \cdot \hat{\Omega}^-)}^a + \overbrace{\frac{\lambda}{2} \int_{\Omega^-} x_{el}(\hat{\Omega}_0 \cdot \hat{\Omega}') R(\tau, p, \hat{\Omega}', \hat{\Omega}^-) \frac{d\Omega'}{\eta'}}^b + \\
 + \overbrace{\frac{\lambda}{2} \int_{\Omega^-} R(\tau, p, \hat{\Omega}_0, \hat{\Omega}') x_{el}(\hat{\Omega}' \cdot \hat{\Omega}^-) \frac{d\Omega'}{\eta'}}^c + \\
 + \overbrace{\lambda \int_{\Omega^-} \int_{\Omega^-} R(\tau, p, \hat{\Omega}_0, \hat{\Omega}') x_{el}(\hat{\Omega}' \cdot \hat{\Omega}'') R(\tau, p, \hat{\Omega}'', \hat{\Omega}^-) \frac{d\Omega'}{\eta'} \frac{d\Omega''}{\eta''}}^d,
 \end{aligned} \tag{9}$$

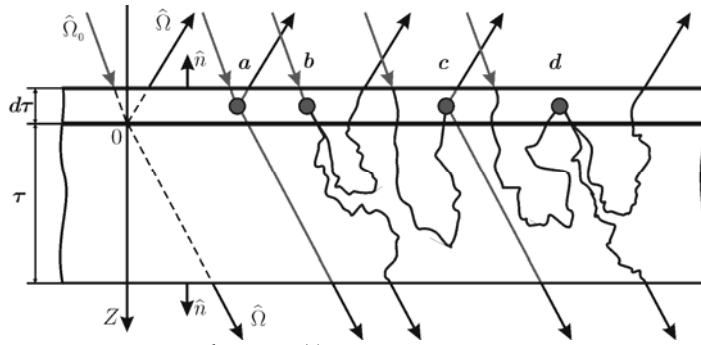


Рис. 3.1. Иллюстрация к формуле (9)

Формулу (9) можно наглядно проиллюстрировать схемой, представленной на рис. 3.1. Правая часть формулы (9) - это математическая запись процессов, которые возникли за счет добавления сверху к слою тонкой полоски $d\tau$. На рис. 3.1 показаны процессы, которые появляются в этом случае: процесс a - однократное рассеяние в слое $d\tau$; b - однократное в слое, $d\tau$ затем многократное рассеяние в слое τ ; c - многократное рассеяние в слое τ , затем однократное в слое $d\tau$; d - многократное рассеяние в слое τ , затем однократное в слое $d\tau$, после которого опять многократное в слое τ .

К интегро-дифференциальному уравнению (9) необходимо добавить граничное условие, которое учитывает тот факт, что если нет рассеивающего слоя, то и нет отраженного многократно рассеянного потока:

$$R(0, p, \hat{\Omega}_0, \hat{\Omega}^-) = 0. \quad (10)$$

Однократное рассеяние

Если в уравнении (9) убрать процессы b , c и d , то получим уравнение, описывающие однократное рассеяние:

$$\frac{d}{d\tau} R(\tau, p, \hat{\Omega}_0, \hat{\Omega}^-) + \frac{\xi + |\mu|}{\xi |\mu|} \Lambda(p) R(\tau, p, \hat{\Omega}_0, \hat{\Omega}^-) = \frac{\lambda}{4} x_{el}(\hat{\Omega}_0 \cdot \hat{\Omega}^-), \quad (11)$$

Решение (11) с граничным условием (10) имеет вид

$$R(\tau, p, \hat{\Omega}_0, \hat{\Omega}^-) = \frac{\lambda}{4} \frac{\xi |\mu|}{\xi + |\mu|} \frac{x_{el}(\hat{\Omega}_0 \cdot \hat{\Omega}^-)}{\Lambda(p)} \left(1 - \exp\left[-\frac{\xi + |\mu|}{\xi |\mu|} \Lambda(p) \tau\right] \right). \quad (12)$$

Формулы в однократном приближении справедливы для очень тонких слоев $\tau \ll 1$. Формулы (12) впервые были получены в теории переноса оптического излучения, а затем использовались в теории переноса электронов, ионов и нейтронов.

Разложение в ряд по кратности упругого рассеяния

Подставляя решения для однократного рассеяния (12) в правую часть уравнения, получим уравнение для двукратного рассеяния. Многократное применение этой итерационной схемы дает решение в виде ряда Неймана:

$$R(\tau, p, \hat{\Omega}_0, \hat{\Omega}^-) = \sum_{n=1}^{\infty} R_n(\tau, \hat{\Omega}_0, \hat{\Omega}^-) \left(\frac{\lambda}{\Lambda(p)} \right)^n. \quad (13)$$

Физический смысл решения (13) - разложение в ряд по кратности упругого рассеяния.

Ряд Неймана быстро сходится, если достаточно мала величина λ и/или $\tau < 1$. В этом случае значителен вклад рассеяний малой кратности. Если однократное альbedo близко к единице и/или среда толстая $\tau > 1$, то ряд Неймана сходится чрезвычайно медленно. При этом вклад многократных рассеяний будет определяющим. При увеличении степени вытянутости индикатрисы, становится проблематичным многократное численное интегрирование. Объем вычислений увеличиваются, если рассматривать рассеяния при начальных углах падения отличных от нор-

мального. Поэтому актуальна задача разработки быстрого метода расчета, учитывающего многократное рассеяние.

Разделение на упругий и неупругий каналы рассеяния для атомных частиц

Если на поверхность падают атомные частицы, то уравнение (9) описывает Лаплас-образ функции отражения. Процедура обратного преобразования Лапласа часто приводит к невозможности провести расчеты при использовании реальных дифференциальных сечений неупругого рассеяния. Поэтому необходим метод, позволяющий рассчитывать функции отражения и пропускания для любой реальной ситуации. Основа такого метода может послужить разделению рассеяния на упругое и неупругое. Следует ожидать что если «элементарное» рассеяние разделяется на два канала, то и многократное рассеяние тоже должно разделиться.

Рассмотрим структуру выражений в решении, записанного в виде ряда Неймана (13):

$$\begin{aligned} \left(\frac{\lambda}{\Lambda(p)} \right)^n &= \frac{1}{\left[1 + \frac{\sigma_m}{\sigma_{el}} (1 - x_m(p)) \right]^n} = \\ &= \int_0^\infty e^{-\frac{\sigma_m}{\sigma_{el}}(1-x_m(p))u} e^{-u} \frac{u^{n-1}}{(n-1)!} du \end{aligned} \quad (14)$$

Последнее равенство можно найти в любом справочнике интегралов (например, в [64]). Подставим его в (14) и, используя обратное преобразование Лаплас по переменной Δ , получаем, что функцию отражения можно представить в виде свертки:

$$R(\tau, \Delta, \hat{\Omega}_0, \hat{\Omega}^-) = \int_0^\infty A_R(\tau, u, \hat{\Omega}_0, \hat{\Omega}^-) T_{in}(u \chi, \Delta) du \quad (15)$$

где $\chi = \sigma_m / \sigma_{el}$, u – безразмерный пробег, отнесенный к упругой длине $l_{el} = 1/n_0 \sigma_{el}$,

$$A_R(\tau, u, \hat{\Omega}_0, \hat{\Omega}^-) = e^{-u} \sum_{n=1}^\infty R_n(\tau, \hat{\Omega}_0, \hat{\Omega}^-) \frac{u^{n-1}}{(n-1)!} \quad (16)$$

функция распределения частиц по длинам пробегов, отраженных от мишени толщиной τ ,

$$T_{in}(u, \chi, \Delta) = \frac{1}{2\pi i} \int_{-i\infty}^{+i\infty} \exp\left(-(1-x_{in}(p))u\chi - p\Delta\right) dp \quad (17)$$

неупругая функция пропускания. Неупругая функция пропускания не что иное как общее решение Ландау, подробно рассмотренное в лабораторной работе 2. Проблемы, возникающие при использовании общего решения Ландау, носят чисто вычислительный характер и диктуются необходимостью использования обратного преобразования Лапласа.

Функции $A_R(\cdot)$ и $T_{in}(\cdot)$ являются решением двух независимых друг от друга задач: 1) определения плотности потока атомных частиц, прошедших путь в мишени $u l_{el}$ и отраженных в направлении $\hat{\Omega}^-$ («упругая» задача); 2) определения плотности потока частиц потерявших энергию Δ по неупругому каналу при прохождении пути $u l_m$, если они двигаются прямо вперед («неупругая» задача). Таким образом, произошло разделение многократного рассеяния атомных частиц на упругий канал рассеяния и неупругий.

Если использовать разложение неупругой функции пропускания в виде разложения по кратности неупругого рассеяния, то функцию отражения можно записать в виде ряда по кратности неупругого рассеяния:

$$R(\tau, \Delta, \hat{\Omega}_0, \hat{\Omega}^-) = \delta(\Delta) C_0(\tau, \hat{\Omega}_0, \hat{\Omega}^-) + \sum_{n=1}^{\infty} C_n(\tau, \hat{\Omega}_0, \hat{\Omega}^-) y_n(\Delta), \quad (18)$$

где $y_n(\Delta) = \int_0^{\Delta} y_{n-1}(\Delta - \varepsilon) x_m(\varepsilon) d\varepsilon$,

$$C_n(\tau, \hat{\Omega}_0, \hat{\Omega}^-) = e^{-u} \int_0^{\infty} A_R(\tau, u, \hat{\Omega}_0, \hat{\Omega}^-) \frac{u^n}{n!} du. \quad (19)$$

Сделаем преобразование Лапласа по переменной u решения (16):

$$A_R(\tau, s, \hat{\Omega}_0, \hat{\Omega}^-) = \sum_{n=1}^{\infty} R_n(\tau, \hat{\Omega}_0, \hat{\Omega}^-) \left(\frac{1}{1+s} \right)^n. \quad (20)$$

Сравнивая (13) и (20) заметим, что решения подобны, если делать замены

$$\begin{pmatrix} \lambda \\ \Lambda(p) \\ \tau \end{pmatrix} \Leftrightarrow \begin{pmatrix} 1 \\ 1+s \\ \tau\lambda \end{pmatrix}. \quad (21)$$

Это позволяет записать для функции распределения частиц по длинам пробегов $A_R(\cdot)$ уравнения подобные (9) и его решения в различных приближениях.

Для примера запишем решение для $A_R(\cdot)$, описывающее однократное рассеяние, подставляя (21) в (12)

$$A_R(\tau, s, \hat{\Omega}_0, \hat{\Omega}^-) = \frac{1}{4} \frac{|\xi| |\mu|}{\xi + |\mu|} \frac{x_{el}(\hat{\Omega}_0 \cdot \hat{\Omega}^-)}{1+s} \left(1 - \exp \left(- \frac{\xi + |\mu|}{|\xi| |\mu|} (1+s) \lambda \tau \right) \right). \quad (22)$$

Сделаем обратное преобразование

$$A_R(\tau, u, \hat{\Omega}_0, \hat{\Omega}^-) = \frac{\exp(-u)}{4} \frac{|\xi| |\mu|}{\xi + |\mu|} x_{el}(\hat{\Omega}_0 \cdot \hat{\Omega}^-) \left(\Theta(u) - \Theta \left(u - \frac{\xi + |\mu|}{|\xi| |\mu|} \lambda \tau \right) \right), \quad (23)$$

где $\Theta(\cdot)$ - функция единичного скачка.

Рассеяние с одним «сильным» столкновением

Если в уравнении (9) исключить процесс d , то получим линейризованное уравнение, описывающие отражение с одним «сильным» столкновением $R(\cdot)$. Запишем линейризованное уравнение:

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\tau} R(\tau, p, \hat{\Omega}_0, \hat{\Omega}^-) + \frac{\xi + |\mu|}{|\xi| |\mu|} \Lambda(p) R(\tau, p, \hat{\Omega}_0, \hat{\Omega}^-) = \\ = \overbrace{\frac{\lambda}{4} x_{el}(\hat{\Omega}_0 \cdot \hat{\Omega}^-)}^a + \overbrace{\frac{\lambda}{2} \int_{\Omega^-} x_{el}(\hat{\Omega}_0 \cdot \hat{\Omega}') R(\tau, p, \hat{\Omega}', \hat{\Omega}^-) \frac{d\Omega'}{\eta'}}^b + \\ + \overbrace{\frac{\lambda}{2} \int_{\Omega^-} R(\tau, p, \hat{\Omega}_0, \hat{\Omega}') x_{el}(\hat{\Omega}' \cdot \hat{\Omega}^-) \frac{d\Omega'}{\eta'}}^c, \end{aligned} \quad (24)$$

Уравнение (24) без процесса d будет описывать движение частиц, которые до точки «сильного» столкновения двигаются без рассеяния, а затем многократно рассеиваются на углы меньше чем угол при «сильном» столкновении. В точке «сильного» столкновения частица частиц меняет направление движения с нисходящего на восходящего относительно оси OZ .

Классическое квазиоднократное приближение

Для рассеяния в твердом теле электронов и ионов энергий больше нескольких сот эВ характерна сильная вытянутость индикатрисы рассеяния (вероятность рассеяния на малые углы на порядки больше чем на

большие). Например, для рассеяния электронов энергии $E_0 = 40$ кэВ в золоте средний косинус рассеяния равен $\langle \cos \gamma \rangle \cong 1 - 10^{-5}$. Это позволяет перейти к *классическому квазиоднократному приближению*: частицы движутся по прямой без упругого рассеяния («прямо вперед») до «сильного» рассеяния, а затем опять по прямой.

Так как индикатриса сильно вытянута вперед то ее можно игольчатой упругой индикатрисой и подставляя приближение в уравнения (24), после преобразований получим обыкновенное дифференциальное уравнение:

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\tau} R(\tau, p, \hat{\Omega}_0, \hat{\Omega}^-) + \frac{\xi + |\mu|}{\xi |\mu|} \Lambda(p) R(\tau, p, \hat{\Omega}_0, \hat{\Omega}^-) = \\ = \frac{\lambda}{4} x_{el}(\hat{\Omega}_0 \cdot \hat{\Omega}^-) + \frac{\lambda}{\xi} R(\tau, p, \hat{\Omega}', \hat{\Omega}^-) + \frac{\lambda}{|\mu|} R(\tau, p, \hat{\Omega}', \hat{\Omega}^-), \end{aligned} \quad (25)$$

Решая (25) и учитывая (10), получим решение в классическом квазиоднократном приближении для функций отражения и пропускания:

$$R(\tau, p, \hat{\Omega}_0, \hat{\Omega}^-) = \frac{\lambda}{4} \frac{\xi |\mu|}{\xi + |\mu|} \frac{x_{el}(\hat{\Omega}_0 \cdot \hat{\Omega}^-)}{\Lambda(p) - \lambda} \left(1 - \exp \left(- \frac{\xi + |\mu|}{\xi |\mu|} \tau (\Lambda(p) - \lambda) \right) \right). \quad (26)$$

Подставляя (21) в (26), запишем выражение для функции распределения по пробегам в классическом квазиоднократном приближении

$$A_R(\tau, s, \hat{\Omega}_0, \hat{\Omega}^-) = \frac{1}{4} \frac{\xi |\mu|}{\xi + |\mu|} \frac{x_{el}(\hat{\Omega}_0 \cdot \hat{\Omega}^-)}{s} \left(1 - \exp \left(- \frac{\xi + |\mu|}{\xi |\mu|} \lambda \tau s \right) \right). \quad (27)$$

Сделаем обратное преобразование

$$A_R(\tau, u, \hat{\Omega}_0, \hat{\Omega}^-) = \frac{1}{4} \frac{\xi |\mu|}{\xi + |\mu|} x_{el}(\hat{\Omega}_0 \cdot \hat{\Omega}^-) \left(\Theta(u) - \Theta \left(u - \frac{\xi + |\mu|}{\xi |\mu|} \lambda \tau \right) \right). \quad (28)$$

Приближение одного столкновения

Если в классическом однократном приближении использовать непрерывное замедление то получим *приближение одного отклонения* Это приближение используется для интерпретации спектров резерфордовского обратного рассеяния быстрых легких ионов (РОР).

В приближении «непрерывного замедления» неупругая индикатриса равна

$$x_m(p) = 1 - \bar{\varepsilon} l_m p = 1 - \frac{\sigma_E}{\sigma_{in}} p, \quad (29)$$

где σ_E – сечение торможения.

Подставляя (28) и (29) в (15) получим выражение для функции отражения в приближении одного отклонения

$$R(\tau, \Delta, \hat{\Omega}_0, \hat{\Omega}^-) = \frac{\Delta \sigma_{el} x_{el}(\hat{\Omega}_0 \cdot \hat{\Omega}^-)}{4 \sigma_E} \frac{\xi |\mu|}{\xi + |\mu|} \times \left(\Theta(\Delta) - \Theta\left(\Delta - \frac{\xi + |\mu|}{\xi |\mu|} \frac{\tau \sigma_E}{\sigma_{el} + \sigma_{in}}\right) \right). \quad (30)$$

Для ионов потери энергии равны $\Delta = k(\cos \gamma) E_0 - E$, где $k(\cdot)$ - кинематический фактор.

Малоугловое квазиоднократное приближение

В отличие от классического квазиоднократного приближения в малоугловом квазиоднократном приближении до и после «сильного» рассеяния происходит малоугловое многократное рассеяние.

Перейдем к отысканию решения уравнения (24) в малоугловом квазиоднократном приближении.

В настоящей работе малоугловыми мы будем называть приближенные вычисления интегралов от произведения плавных функций на функцию, имеющую очень резкий максимум при нулевых углах рассеяния (каковой будет являться упругая индикатриса $x_{el}(\cos \gamma)$). Подобный вид интегралов позволяет использовать подходы известные в математике как «метод перевала» [18], а также выполнять аналитические продолжения в область, где подынтегральное выражение пренебрежимо мало по сравнению со значениями, достигаемыми в подынтегральном выражении при нулевых углах рассеяния в сечении упругого рассеяния.

Используем метод сферических гармоник и малоугловое приближение решение уравнения (24) разложим в виде ряда по сферическим функциям:

$$R(\tau, p, \hat{\Omega}_0, \hat{\Omega}^-) = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{2} R_l(\tau, p) P_l(\hat{\Omega}_0 \cdot \hat{\Omega}^-). \quad (31)$$

Подставляя (31) в (24), используя свойство ортогональности сферических функций, в малоугловом приближении получаем для коэффицици-

ентов $R_l(\tau, p)$ диагональную систему обыкновенных дифференциальных уравнений:

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\tau} R_l(\tau, p) + \frac{\xi + |\mu|}{\xi |\mu|} \Lambda(p) R_l(\tau, p) = \\ = \frac{\lambda}{4} (2 - x_l) + \frac{\lambda x_l}{\xi} R_l(\tau, p) + \frac{\lambda x_l}{|\mu|} R_l(\tau, p). \end{aligned} \quad (32)$$

Здесь косинусы углов падения ξ и рассеяния μ выступают в качестве параметров.

Решение системы (32) с граничным условием $R_l(\tau, p) = 0$ имеет вид:

$$R_l(\tau, p) = \frac{\lambda}{4} \frac{\xi |\mu|}{\xi + |\mu|} \frac{(2 - x_l)}{\Lambda(p) - \lambda \frac{x_l}{2}} \left(1 - \exp \left(- \frac{\xi + |\mu|}{\xi |\mu|} \tau \left(\Lambda(p) - \lambda \frac{x_l}{2} \right) \right) \right). \quad (33)$$

Подставляя (33) в (31) получим решение для функции отражения в малоугловом квазиоднократном приближении:

$$\begin{aligned} R(\tau, p, \hat{\Omega}_0, \hat{\Omega}^-) = \frac{\lambda}{4} \frac{\xi |\mu|}{\xi + |\mu|} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{2} \frac{(2 - x_l)}{\Lambda(p) - \lambda \frac{x_l}{2}} \times \\ \times \left(1 - \exp \left(- \frac{\xi + |\mu|}{\xi |\mu|} \tau \left(\Lambda(p) - \lambda \frac{x_l}{2} \right) \right) \right) P_l(\hat{\Omega}_0 \cdot \hat{\Omega}^-). \end{aligned} \quad (34)$$

Используя преобразование (21) в решении (34) а далее обратное преобразование Лапласа, запишем выражение для функции распределения по пробегам в малоугловом квазиоднократном приближении

$$\begin{aligned} A_R(\tau, u, \hat{\Omega}_0, \hat{\Omega}^-) = \frac{1}{4} \frac{\xi |\mu|}{\xi + |\mu|} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{2} (2 - x_l) \exp \left(- \left(1 - \frac{x_l}{2} \right) u \right) \times \\ \times \left(\Theta(u) - \Theta \left(u - \frac{\xi + |\mu|}{\xi |\mu|} \lambda \tau \right) \right) P_l(\hat{\Omega}_0 \cdot \hat{\Omega}^-). \end{aligned} \quad (35)$$

В случае приближении «непрерывного замедления», подставляя (35) и (29) в (15) получим выражение для функции отражения:

$$R(\tau, \Delta, \hat{\Omega}_0, \hat{\Omega}^-) = \frac{1}{4} \frac{\sigma_{el}}{\sigma_E} \frac{\xi |\mu|}{\xi + |\mu|} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{2} P_l(\hat{\Omega}_0 \cdot \hat{\Omega}^-) (2 - x_l) \times \\ \times \exp \left(- \left(1 - \frac{x_l}{2} \right) \frac{\Delta \sigma_{el}}{\sigma_E} \right) \left(\Theta(\Delta) - \Theta \left(\Delta - \frac{\xi + |\mu|}{\xi |\mu|} \frac{\tau \sigma_E}{\sigma_{el} + \sigma_{in}} \right) \right). \quad (36)$$

Основные типы энергетических спектров отраженных частиц

Функция отражения описывает энергетические спектры частиц отраженных в телесный угол. Форма экспериментальных энергетических спектров отраженных частиц от однородных аморфных мишеней может быть как простой – спектр в виде плавной кривой с максимумом распределения, так и достаточно сложной – спектр с несколькими узкими высокоэнергетическими пиками. Вид спектра сильно меняется в зависимости от начальной энергии электрона E_0 и материала мишени. Но всё же можно выделить основные типы спектров отраженных атомных частиц, предложенных Машковой и Молчановым:

первый тип — спектр, состоящий из узкого асимметричного пика в области вблизи $k(\gamma)E_0$ (где $k(\gamma)$ — кинематический фактор);

второй тип — спектр, имеющий пик в области вблизи $k(\gamma)E_0$ и «купол» в области средних потерь энергии;

третий тип — спектр, имеющий максимум в области больших потерь энергии;

четвертый тип — спектр, имеющий вид плавно возрастающих кривых.

Первый тип спектров наблюдается в экспериментах характеристических потерь энергии электронов (ХПЭ). Спектры этого вида представляют собой узкие асимметричные пики в области малых потерь энергии и пологий низкоэнергетичный склон. Спектры ХПЭ формируются преимущественно электронами, прошедшими незначительные пути в веществе. Это делает ХПЭ-спектр удобным инструментом исследования элементарного акта неупругого рассеяния. Теоретическая интерпретация ХПЭ-спектра позволит создать методику восстановления сечения элементарного неупругого рассеяния.

Наибольший интерес вызывает область начальных энергий от единиц до нескольких десятков кэВ. Электроны с этими начальными энергиями применяются в разнообразных методах диагностики поверхности. При увеличении энергии E_0 в этом диапазоне наблюдается переход из спектров первого типа в спектры *второго типа*, имеющие как высокоэнергетические пики, так и куполообразную среднеэнергетичную часть. Су-

существующий в настоящее время весьма неполный набор экспериментальных результатов по энергетическим спектрам отражённых электронов отличает значительное количественное, а в ряде случаев и качественное, расхождение данных. Указанное несоответствие экспериментальных результатов объясняется различиями в чистоте поверхности мишеней, различным разрешением энергоанализаторов, неопределенностью в аппаратной функции приборов, используемых для регистрации спектров. Энергетические спектры, снимавшиеся в 50–70-е годы, имеют вид гладких кривых с единственным максимумом. В последние несколько лет были проведены исследования, позволившие наблюдать СОЭ сложной пиково-купольной формы. Отсутствие упругого пика в энергетических спектрах объясняется низким вакуумом, приводящим к загрязнению поверхности и невысоким энергетическим разрешением.

При начальных энергиях порядка сотни кэВ пики в высокоэнергетической части спектра перестают наблюдаться и распределение приобретает форму купола. Эти спектры будем относить к *третьему типу*. В этом случае требования к экспериментальной установке снижаются, так как снимаемые спектры менее чувствительны к чистоте поверхности мишени. Спектры неупругоотраженных электронов представляют собой гладкие кривые с хорошо развитым «куполом». Причем максимум СОЭ смещается в область более высоких потерь энергии при увеличении E_0 .

Если увеличивать энергию падающего пучка, то спектры будут переходить из третьего типа в *четвертый тип*. Спектры четвертого типа представляют собой плавно возрастающие кривые в высоко- и среднеэнергетической части с резким линейным спадом в низкоэнергетической части спектра.

Спектры характеристических потерь энергии отраженных электронов

Интерпретация экспериментальных данных, измеряемых вблизи упругого пика для ряда методик диагностики поверхности твердого тела, требует описания процесса электронного рассеяния, включающего одновременный учет упругого и неупругого каналов. Постановка такого рода задач диктуется необходимостью учета фактора обратного рассеяния в локальном рентгеноспектральном анализе и Оже-спектроскопии, но наиболее прямым приложением рассматриваемых в настоящем параграфе задач являются эксперименты по спектроскопии характеристических потерь отраженных электронов (ХПЭ).

Спектры ХПЭ (спектры первого типа) имеют четко выраженную пиковую структуру и формируются преимущественно электронами, прошедшими незначительные пути в веществе $u \ll l_{tr}$. Всё это делает ХПЭ спектр

удобным инструментом исследования элементарного акта неупругого рассеяния. Таким образом, теоретическая интерпретация ХПЭ спектра позволит создать методику восстановления сечения «элементарного» неупругого рассеяния $\omega_{in}(\Delta)$.

Для интерпретации спектров ХПЭ необходимо использовать неупругие индикатрисы $x_{in}(\Delta)$, детально учитывающие все особенности неупругого рассеяния электронов в твердом теле (см. лабораторную работу 2). Так как спектр снимается в области потерь энергии $\Delta \approx 200$ эВ, то можно использовать односкоростное приближение. Спектр отраженных электронов формируют электроны прошедших путь меньше транспортной длины, поэтому при вычислении распределения частиц по пробегам можно использовать малоугловое квазиоднократное приближение (35). Упругая и неупругая задача решаются независимо друг от друга. Так как в интересующем нас диапазоне потерь энергии определяющую роль будет играть неупругое рассеяние малой кратности, то функцию отражения лучше рассчитывать по формулам (18) и (19).

В спектрах ХПЭ выделяются особенности, связанные как с поверхностными возбуждениями (например, поверхностный плазмон), так и с возбуждениями, специфичными для объема твердого тела, удаленного от поверхности (объемный плазмон), что приводит к необходимости рассматривать исследуемую мишень как слоисто-неоднородную с разными с неупругими индикатрисами в поверхностном слое $x_{in}^s(\Delta)$ и объеме $x_{in}^b(\Delta)$. Различия в спектрах электронных возбуждений в поверхностных слоях и массиве мишени заставляют выполнять интерпретацию спектров ХПЭ спектроскопии, представляя мишень в виде многослойной. На полубесконечной мишени выделяется приповерхностный плоскопараллельный слой (s) толщиной d_s , в котором потери энергии определяются потерями на возбуждение поверхностного плазмона. Вне этого слоя потери энергии это потери на возбуждение объемного плазмона (b). Ионизационные потери возможны во всей толще мишени. Упругое рассеяние одинаковое по всей глубине мишени.

В квазиоднократной модели формула для расчета спектров отраженных электронов будет иметь вид:

$$R_{s,b}(\tau, \Delta, \hat{\Omega}_0, \hat{\Omega}^-) = R_b(\Delta, \hat{\Omega}_0, \hat{\Omega}^-) + \int_0^{\Delta} \int_{\Omega^-} (R_s(\varepsilon, \hat{\Omega}_0, \hat{\Omega}') - R_b(\varepsilon, \hat{\Omega}_0, \hat{\Omega}')) T_s \left(\frac{\xi + |\mu|}{\xi |\mu|} \tau_s, \Delta - \varepsilon, \hat{\Omega}', \hat{\Omega}^- \right) d\varepsilon d\Omega' \quad (37)$$

Функция отражения электронов от полубесконечной мишени $R_{s,b}(\Delta, \hat{\Omega}_0, \hat{\Omega}^-)$ будем рассчитывать по формулам: (18), (19), (35). Так как приповерхностный слой (s) относительно длины свободного пробега между упругими столкновениями l_{el} очень тонкий, то функцию пропускания будем вычислять в однократном приближении:

$$T_s(\tau_s, \Delta, \hat{\Omega}_0, \hat{\Omega}^-) = T_{in}^s(\tau_s, \chi_s, \Delta) x_{el}^s(\hat{\Omega}_0, \hat{\Omega}^-) \delta(\hat{\Omega}_0 - \hat{\Omega}^-). \quad (38)$$

Задача интерпретации спектров характеристических потерь энергии электронов относится к классу некорректных задач. В нашем случае наиболее эффективным методом решения оказывается метод подбора (фиттинг-процедура). Но задача осложняется необходимостью рассмотрения многослойной ситуации, связанной не только с различными законами потерь энергии в приповерхностных слоях, границах материалов и объемами в которых можно считать материал однородным, но и с покрытием мишени различными слоями окислов.

Энергетические спектры отраженных кэВ-ных электронов

В ряде методик диагностики твердого тела используется в качестве зонда пучок электронов кэВ-ных энергий ($E_0 \sim 5 \dots 50$ кэВ). Энергетические спектры снимают до потерь энергии порядка $0,4E_0$, потому что именно эта часть спектра наиболее информативна. Энергетические спектры кэВ-ных электронов имеют как высокоэнергетические пики, так и куполообразную среднеэнергетическую часть. При теоретической интерпретации таких спектров можно использовать модельные пороговые неупругие индикатрисы, так как вклад неупругих рассеяний малой кратности становится небольшим, но в то же время он заметен. «Купол» энергетических спектров формируются электронами прошедший путь порядка транспортной длины, поэтому можно использовать квазимногократные модели рассеяния (18), (19), (35).

При увеличении энергии ($E_0 > 50$ кэВ) в энергетическом спектре пропадают особенности в области малых потерь энергии. В этом случае спектры будут относиться к третьему типу. Если максимум спектра лежит в обла-

сти потерь энергии $\Delta < 0,4E_0$, то при расчете можно использовать малоугловое квазиднократное приближение. Теоретическая интерпретация таких спектров упрощается, так как флуктуация неупругих потерь энергии перестает играть заметную роль и становится справедливой модель «непрерывного» замедления (36).

Подготовка к лабораторной работе

1. Изучить теоретические основы лабораторной работы.
2. Подготовить, в соответствии с [5,6,16], исходные данные по расчету спектров отраженных частиц.
3. Подготовить программу расчета спектров характеристических потерь энергии отраженных электронов.
4. Подготовить программу расчета энергетических спектров отраженных кэВ-ных электронов.
5. Подготовить программу расчета энергетических спектров отраженных ионов в приближении одного отклонения.

Порядок выполнения лабораторной работы

1. Получить у преподавателя расчетное задание.
2. Ввести в программу исходные данные, выбрать модельную индикатрису и приближение, по которым будут считаться энергетические спектры, соответствующие заданию.
3. Выполнить расчет и графическое сопоставление с экспериментальными данными.
4. Проанализировать полученные данные, сделать заключение о режимах рассеяния в соответствующих диапазонах варьируемых параметров.
5. Оформить протокол лабораторной работы. Протокол должен содержать: описание расчетного задания, листинг результатов расчетов на ЭВМ, графики экспериментальных и расчетных зависимостей, заключение о режимах рассеяния в соответствующих диапазонах варьируемого параметра.

Контрольные вопросы к лабораторной работе

1. Дайте определение функции отражения, угловым распределением отраженных частиц, коэффициенту отражения.
2. Сформулируйте принцип инвариантности.

3. Напишите формулу для функции отражения в однократном приближении.
4. Физический смысл ряда Неймана для функции отражения.
5. Напишите формулу для функции пропускания, используя разделение на упругий и неупругий каналы рассеяния для атомных частиц.
6. Дайте определение функции распределения частиц по длинам пробегов, отраженных от мишени.
7. Что значит рассеяние с одним «сильным» столкновением?
8. В чем суть классического квазиоднократного приближения.
9. В чем суть приближения одного столкновения.
10. В чем суть малоуглового квазиоднократного приближения.
11. Перечислите основные типы энергетических спектров отраженных частиц.