

ЛАБОРАТОРНАЯ РАБОТА 4
**Спектры электронов, упруго рассеянных слоисто
неоднородной мишенью**

Цель работы: Целью работы является изучение спектров электронов упруго-рассеянных плоскопараллельными слоями твердого тела. Ознакомление с процессом одновременной деградации и изотропизации пучка электронов при его транспортировке в твердом теле. Изучение методов решения граничных задач теории переноса методами инвариантного погружения. Овладение методикой расчета спектров электронов упруго-рассеянных плоскопараллельными слоями твердого тела в малоугловом квазиднократном приближении.

Спектроскопия упруго-рассеянных электронов

В электронной спектроскопии активно развиваются методы определения компонентного и послойного состава поверхностей твердых тел, основанные на анализе угловых и энергетических спектров упруго-рассеянных электронов (электронное резерфордское рассеяние). На рис. 1 представлен энергетический спектр упруго-рассеянных электронов, прошедших двухслойную мишень из углерода покрытого сверху тонкой пленкой золота Au/C . Точками показаны экспериментальные данные [1] полученные в геометрии эксперимента (с): нормальное падение потока электронов с энергией $E_0 = 40$ кэВ на слой, рассеяние на угол 44.6° от нормали к нижней поверхности слоя. Энергетический спектр электронов упруго-рассеянных от мишени с хорошей точностью можно описать функцией Гаусса:

$$G(\Delta) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_\Sigma} \exp\left[-\frac{(\Delta - \Delta_k(\gamma))^2}{2\sigma_\Sigma^2}\right], \quad (1)$$

где $\Delta = E_0 - E$ - потери энергии, E_0 - начальная энергия, E - энергия, $\Delta_k(\gamma)$ - смещение пика, γ - угол рассеяния, σ_Σ - полуширина на полувысоте сигнала упруго-рассеянных электронов. Сплошной линией на рис. 1 показана интерпретация пика упруго-рассеянных электронов от

углерода функцией Гаусса, пунктирной линией – от золота, пунктиром с точкой – сумма двух функций Гаусса. Таким образом, спектр упруго-рассеянных электронов от одного типа атомов характеризуется тремя основными параметрами:

- ✓ Смещением пика Δ_k относительно начальной энергии E_0 в область меньших, чем E_0 энергий. Величина смещения хорошо соответствует формуле, следующей из законов сохранения энергии и импульса:

$$\Delta_k(\gamma) = E_0 - k(\gamma)E_0 = (2m / M)(1 - \cos \gamma)E_0, \quad (2)$$

где m - масса электрона, M - масса атома мишени, $k(\gamma)$ - кинематический фактор.

- ✓ Уширением пика упруго отраженных электронов $\sigma_\Sigma = \sqrt{\sigma_T^2 + \sigma_A^2 + \sigma_E^2}$: а) связанным с тепловым движением ядер мишени σ_T , от которых отражаются электроны, б) вызываемым аппаратной функцией энергоанализатора σ_A , в) вызываемым энергетическим разбросом зондирующего пучка σ_E . Величины σ_A и σ_E являются характеристиками аналитического прибора, с помощью которого снимается спектр.
- ✓ Интенсивностью сигнала или площадью под пиком упруго-рассеянных электронов: прошедших сквозь слой электронов $T_{el}(\cdot)$ или отраженных от слоя $R_{el}(\cdot)$.

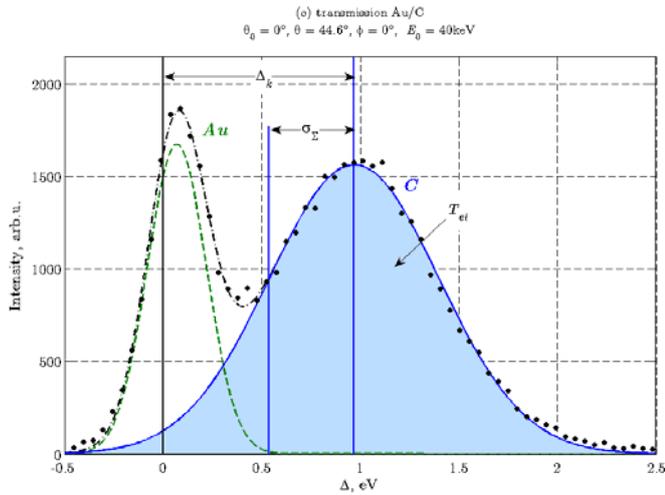


Рис. 4.1. Энергетический спектр упруго-рассеянных электронов, прошедших мишень Au/C

Теоретическому анализу интенсивности сигнала пика упруго-рассеянных электронов прошедших сквозь слой электронов $T_{el}(\cdot)$ и отраженных от слоя $R_{el}(\cdot)$ посвящена настоящая работа.

Теоретическое описание

Модель упругого рассеяния электронов плоским слоем

При рассеянии в среде электроны будут изменять направление движения, терять энергию Δ . Нас интересуют только упругие потери энергии (2). Для этого необходимо хотя бы одно «сильное» столкновение заметно изменяющее направление движения. Вероятность частице пройти в мишени путь u избежать при этом акт неупругого рассеяния описывается экспонентой $\exp(-n_0 \sigma_{in} u)$, где σ_{in} - сечение неупругого рассеяния, n_0 - концентрация атомов мишени. Так как вероятность рассеяния на большой угол («сильное» рассеяние) для электронов кэВ-ных энергий на порядки меньше чем на малые углы, то движение будет укладываться в квазиподобную модель и функции отражения и пропускания электронов можно разделить по энергетическим и угловым переменным. Если нам

известно распределение отраженных от слоя электронов по длинам пробега в мишени $A_R(u, d, \hat{\Omega}_0, \hat{\Omega})$ или прошедших слой электронов по длинам пробега $A_T(u, d, \hat{\Omega}_0, \hat{\Omega})$, то спектр упруго-отраженных от слоя электронов будет описываться функцией отражения $R(d, \Delta, \hat{\Omega}_0, \hat{\Omega})$, а спектр упруго-прошедших частиц – функцией пропускания $T(d, \Delta, \hat{\Omega}_0, \hat{\Omega})$:

$$\begin{aligned} R(d, \Delta, \hat{\Omega}_0, \hat{\Omega}) &= G(\Delta, \hat{\Omega}_0 \cdot \hat{\Omega}) \int_0^{\infty} A_R(u, d, \hat{\Omega}_0, \hat{\Omega}) e^{-n_0 \sigma_m u} du, \\ T(d, \Delta, \hat{\Omega}_0, \hat{\Omega}) &= G(\Delta, \hat{\Omega}_0 \cdot \hat{\Omega}) \int_0^{\infty} A_T(u, d, \hat{\Omega}_0, \hat{\Omega}) e^{-n_0 \sigma_m u} du, \end{aligned} \quad (3)$$

Описание угловых распределений интенсивности упруго-отраженных и упруго-прошедших электронов методами инвариантного погружения

Функции $A_R(\cdot)$ и $A_T(\cdot)$ являются решением граничной задачи переноса упруго-рассеянных электронов в твердом теле. Описание процесса упругого взаимодействия потока электронов с веществом будем вести на основе уравнения Льюиса-Спенсера:

$$\begin{aligned} \mu \frac{d}{dz} A(u, z, \hat{\Omega}_0, \hat{\Omega}) + \frac{d}{du} A(u, z, \hat{\Omega}_0, \hat{\Omega}) + n_0 \sigma_{el} A(u, z, \hat{\Omega}_0, \hat{\Omega}) = \\ = n_0 \int_{4\pi} A(u, z, \hat{\Omega}_0, \hat{\Omega}') \omega_{el}(\hat{\Omega} \cdot \hat{\Omega}') d\Omega' \end{aligned} \quad (4)$$

с граничным условием в случае плоского источника

$$\begin{cases} A(0, z, \hat{\Omega}_0, \hat{\Omega}) = 0, & z > 0, \\ A(u, 0, \hat{\Omega}_0, \hat{\Omega}) = \delta(\hat{\Omega}_0 - \hat{\Omega}), & \mu > 0, \\ A(u, d, \hat{\Omega}_0, \hat{\Omega}) = 0, & \mu < 0, \end{cases} \quad (5)$$

где $A(u, z, \hat{\Omega}_0, \hat{\Omega})$ – функция распределения электронов по пробегам u , упавших на поверхность в направлении $\hat{\Omega}_0$ и движущихся в точке z в направлении $\hat{\Omega}$, $\mu = \hat{z} \cdot \hat{\Omega}$ – косинус угла между направлением движения $\hat{\Omega}$ и осью OZ , $\omega_{el}(\cdot)$ – дифференциальное сечение упругого рассеяния электронов в твердом теле.

Поскольку нас интересуют частицы, избежавшие в процессе своего движения в мишени неупругие взаимодействия, вероятность чего, как уже отмечалось, определяется формулой $\exp(-n_0 \sigma_{in} u)$, перейдем, аналогично (3), к новой переменной:

$$L(z, \hat{\Omega}_0, \hat{\Omega}) = \int_0^{\infty} A(u, z, \hat{\Omega}_0, \hat{\Omega}) e^{-n_0 \sigma_{in} u} du, \quad (6)$$

описывающей интенсивность потока упруго-рассеянных электронов. Для этой функции из формул (4) и (6) следует уравнение:

$$\mu \frac{d}{d\tau} L(\tau, \hat{\Omega}_0, \hat{\Omega}) + L(\tau, \hat{\Omega}_0, \hat{\Omega}) = \frac{\lambda}{4\pi} \int_{4\pi} L(\tau, \hat{\Omega}_0, \hat{\Omega}') x_{el}(\hat{\Omega} \cdot \hat{\Omega}') d\Omega' \quad (7)$$

с граничным условием

$$\begin{cases} L(0, \hat{\Omega}_0, \hat{\Omega}) = \delta(\hat{\Omega}_0 - \hat{\Omega}), & \mu > 0, \\ L(\tau, \hat{\Omega}_0, \hat{\Omega}) = 0, & \mu < 0, \end{cases} \quad (8)$$

где $\lambda = \sigma_{el} / (\sigma_{el} + \sigma_{in})$ - однократное альбедо упруго-рассеянных электронов, $\tau = n_0 (\sigma_{el} + \sigma_{in}) z$ - безразмерная толщина, $x_{el}(\cdot)$ - упругая индикатриса рассеяния.

Уравнение (7) в точности подобно уравнению переноса оптического излучения. В оптике функция $L(\cdot)$ имеет смысл яркости излучения. Установленное соответствие задач переноса оптического излучения и задач переноса упруго-рассеянных электронов позволят применить обширный теоретический опыт, накопленный в области исследования рассеяния света. В данной работе граничную задачу уравнения переноса (7) с (8) мы будем решать методом инвариантного погружения, впервые примененным для решения задачи отражения оптического излучения от полубесконечной мутной среды.

В ходе решения граничной задачи необходимо найти функцию отражения и функцию пропускания, которые связаны с интенсивностью потока упруго-рассеянных электронов:

$$\left\{ \begin{array}{l} R_{el}(\tau, \hat{\Omega}_0, \hat{\Omega}^-) = \int_0^\infty A_R(u, d, \hat{\Omega}_0, \hat{\Omega}^-) e^{-n_0 \sigma_m u} du = \\ \qquad \qquad \qquad = \frac{1}{N_0 |\mu|} L(0, \hat{\Omega}_0, \hat{\Omega}^-), \qquad -1 \leq \mu < 0, \\ T_{el}(\tau, \hat{\Omega}_0, \hat{\Omega}^+) = \int_0^\infty A_T(u, d, \hat{\Omega}_0, \hat{\Omega}^+) e^{-n_0 \sigma_m u} du = \\ \qquad \qquad \qquad = \frac{1}{N_0 \mu} L(d, \hat{\Omega}_0, \hat{\Omega}^+), \qquad 0 < \mu \leq 1. \end{array} \right. \quad (9)$$

Здесь $\hat{\Omega}^-$ - направления в верхнюю полусферу относительно оси OZ (см. рис. 4.1), $\hat{\Omega}^+$ - направления в верхнюю полусферу.

Общее решение инвариантного погружения приводит нас к системе из четырёх уравнений для функций пропускания и отражения. Построение уравнений происходит по схеме: находится изменение функций $R(\cdot)$ и $T(\cdot)$ (здесь и в дальнейшем индекс « el » будем опускать) при добавлении к слою толщиной τ сверху или снизу полоски толщиной $d\tau$, настолько тонкой, что $d\tau \ll 1$ и процессами двукратного рассеяния в слое $d\tau$ можно пренебречь. Выполнив указанные выше выкладки, приходим к системе уравнений, впервые полученной С.Чандрасекаром:

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\tau} R(\tau, \hat{\Omega}_0, \hat{\Omega}^-) + \frac{\xi + |\mu|}{\xi |\mu|} R(\tau, \hat{\Omega}_0, \hat{\Omega}^-) = \\ = \overbrace{\frac{\lambda}{4} x_{el}(\hat{\Omega}_0 \cdot \hat{\Omega}^-)}^a + \overbrace{\frac{\lambda}{2} \int_{\Omega^-} x_{el}(\hat{\Omega}_0 \cdot \hat{\Omega}') R(\tau, \hat{\Omega}', \hat{\Omega}^-) \frac{d\Omega'}{\eta'}}^b + \\ + \overbrace{\frac{\lambda}{2} \int_{\Omega^-} R(\tau, \hat{\Omega}_0, \hat{\Omega}') x_{el}(\hat{\Omega}' \cdot \hat{\Omega}^-) \frac{d\Omega'}{\eta'}}^c + \\ + \lambda \overbrace{\int_{\Omega^-} \int_{\Omega^-} R(\tau, \hat{\Omega}_0, \hat{\Omega}') x_{el}(\hat{\Omega}' \cdot \hat{\Omega}'') R(\tau, \hat{\Omega}'', \hat{\Omega}^-) \frac{d\Omega'}{\eta'} \frac{d\Omega''}{\eta''}}^d, \end{aligned} \quad (10)$$

$$\begin{aligned}
& \frac{d}{d\tau} T(\tau, \hat{\Omega}_0, \hat{\Omega}^+) + \frac{1}{\xi} T(\tau, \hat{\Omega}_0, \hat{\Omega}^+) = \\
& = \overbrace{\frac{\lambda}{4} e^{-\frac{\tau}{|\mu|}} x_{el}(\hat{\Omega}_0 \cdot \hat{\Omega}^-)}^a + \overbrace{\frac{\lambda}{2} \int_{\Omega^+} x_{el}(\hat{\Omega}_0 \cdot \hat{\Omega}') T(\tau, \hat{\Omega}', \hat{\Omega}^+) \frac{d\Omega'}{\eta'}}^b + \\
& + \overbrace{\frac{\lambda}{2} e^{-\frac{\tau}{|\mu|}} \int_{\Omega^-} R(\tau, \hat{\Omega}_0, \hat{\Omega}') x_{el}(\hat{\Omega}' \cdot \hat{\Omega}^+) \frac{d\Omega'}{\eta'}}^c + \\
& + \lambda \overbrace{\int_{\Omega^+} \int_{\Omega} R(\tau, \hat{\Omega}_0, \hat{\Omega}') x_{el}(\hat{\Omega}' \cdot (-\hat{\Omega}'')) T(\tau, \hat{\Omega}'', \hat{\Omega}^+) \frac{d\Omega'}{\eta'} \frac{d\Omega''}{\eta''}}^d,
\end{aligned} \tag{11}$$

$$\begin{aligned}
& \frac{d}{d\tau} R(\tau, \hat{\Omega}_0, \hat{\Omega}^-) = \overbrace{\frac{\lambda}{4} e^{-\frac{\xi+|\mu|}{\xi|\mu|\tau} \tau} x_{el}(\hat{\Omega}_0 \cdot \hat{\Omega}^-)}^{a'} + \\
& + \overbrace{\frac{\lambda}{2} e^{-\frac{1}{\xi}\tau} \int_{\Omega^+} x_{el}(\hat{\Omega}_0 \cdot (-\hat{\Omega}')) T(\tau, \hat{\Omega}', \hat{\Omega}^-) \frac{d\Omega'}{\eta'}}^{b'} + \\
& + \overbrace{\frac{\lambda}{2} e^{-\frac{1}{|\mu|}\tau} \int_{\Omega^+} T(\tau, \hat{\Omega}_0, \hat{\Omega}') x_{el}(-\hat{\Omega}' \cdot \hat{\Omega}^-) \frac{d\Omega'}{\eta'}}^{c'} + \\
& + \lambda \overbrace{\int_{\Omega^+} \int_{\Omega^+} T(\tau, \hat{\Omega}_0, \hat{\Omega}') x_{el}(\hat{\Omega}' \cdot (-\hat{\Omega}'')) T(\tau, \hat{\Omega}'', \hat{\Omega}^-) \frac{d\Omega'}{\eta'} \frac{d\Omega''}{\eta''}}^{d'},
\end{aligned} \tag{12}$$

$$\begin{aligned}
& \frac{d}{d\tau} T(\tau, \hat{\Omega}_0, \hat{\Omega}^+) + \frac{1}{|\mu|} T(\tau, \hat{\Omega}_0, \hat{\Omega}^+) = \\
& \overbrace{\frac{\lambda}{4} e^{-\frac{\tau}{\xi}} x_{el}(\hat{\Omega}_0 \cdot \hat{\Omega}^+)}^{a'} + \overbrace{\frac{\lambda}{2} e^{-\frac{\tau}{\xi}} \int_{\Omega^+} x_{el}(\hat{\Omega}_0 \cdot \hat{\Omega}') R(\tau, \hat{\Omega}', \hat{\Omega}^+) \frac{d\Omega'}{\eta'}}^{b'} + \\
& \overbrace{\frac{\lambda}{2} \int_{\Omega^+} T(\tau, \hat{\Omega}_0, \hat{\Omega}') x_{el}(\hat{\Omega}' \cdot \hat{\Omega}^+) \frac{d\Omega'}{\eta'}}^{c'} + \\
& \overbrace{\lambda \int_{\Omega^-} \int_{\Omega^+} T(\tau, \hat{\Omega}_0, \hat{\Omega}') x_{el}(\hat{\Omega}' \cdot (-\hat{\Omega}'')) R(\tau, \hat{\Omega}'', \hat{\Omega}^+) \frac{d\Omega'}{\eta'} \frac{d\Omega''}{\eta''}}^d,
\end{aligned} \tag{13}$$

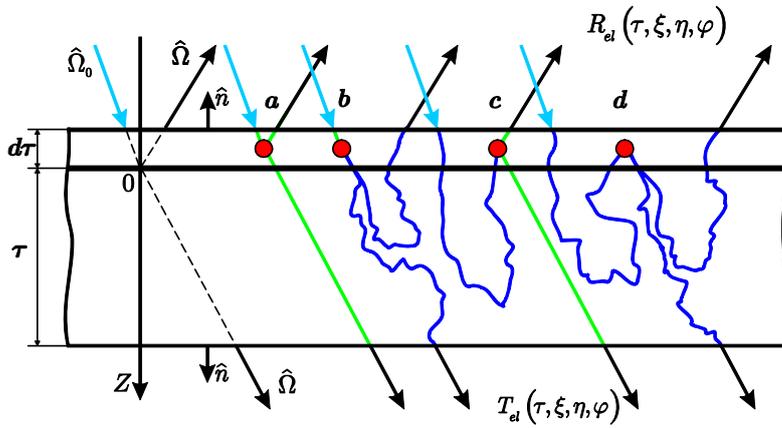


Рис. 4.2. Иллюстрация к формулам (10) и (11)

Здесь Ω^- - верхняя полусфера, Ω^+ - нижняя полусфера.

Формулы (10) и (11) можно наглядно проиллюстрировать схемами, представленными на рис. 4.2. Правая часть формул (10) и (11) - это математическая запись процессов, которые возникли за счет добавления сверху к слою тонкой полоски $d\tau$. На рис. 4.2 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 . Если добавить полоску толщиной $d\tau$, выполненную из материала слоя, к нижней стороне слоя, то приходим к уравнениям (12) и (13). На рис. 4.3 показаны процессы, которые появляются в этом случае: процесс a' - однократное рассеяние в слое $d\tau$; b' - без рассеяния в слое τ , 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 .

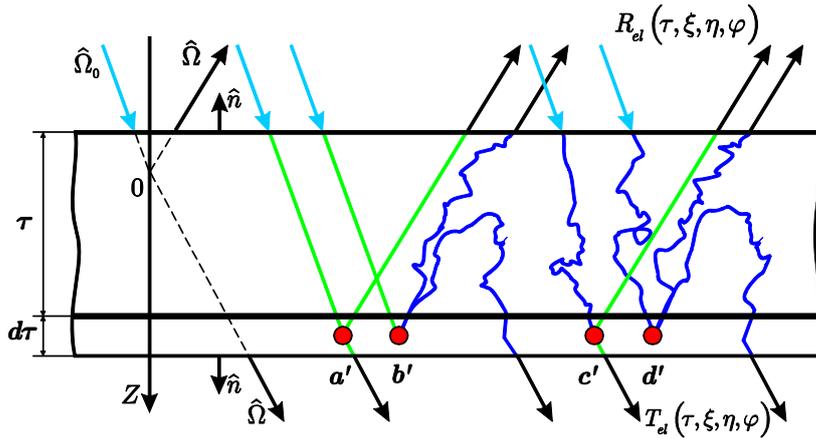


Рис. 4.3. Иллюстрация к формулам (12) и (13)

К интегро-дифференциальным уравнениям (10) - (13) необходимо добавить граничные условия, которые отражают тот факт, что если нет рассеивающего слоя, то и нет отраженного и прошедшего многократно-рассеянного потока:

$$R(0, \hat{\Omega}_0, \hat{\Omega}^-), T(0, \hat{\Omega}_0, \hat{\Omega}^+) = 0 \quad (14)$$

Таким образом, формула (14) указывает, что функция пропускания $T(\cdot)$ описывает только те частицы, которые прошли слой, испытав при этом акты рассеяния

Однократное рассеяние

Если в уравнениях (10) и (11) убрать процессы b , c и d , то получим уравнения, описывающие однократное рассеяние:

$$\begin{cases} \frac{d}{d\tau} R(\tau, \hat{\Omega}_0, \hat{\Omega}^-) + \frac{\xi + |\mu|}{\xi |\mu|} R(\tau, \hat{\Omega}_0, \hat{\Omega}^-) = \frac{\lambda}{4} x_{el}(\hat{\Omega}_0 \cdot \hat{\Omega}^-), \\ \frac{d}{d\tau} T(\tau, \hat{\Omega}_0, \hat{\Omega}^+) + \frac{1}{\xi} T(\tau, \hat{\Omega}_0, \hat{\Omega}^+) = \frac{\lambda}{4} e^{-\frac{\tau}{|\mu|}} x_{el}(\hat{\Omega}_0 \cdot \hat{\Omega}^-). \end{cases} \quad (15)$$

Решение системы (15) с граничными условиями (14) имеет вид

$$\begin{cases} R(\tau, \hat{\Omega}_0, \hat{\Omega}^-) = \lambda \frac{\xi |\mu|}{\xi + |\mu|} x_{el}(\hat{\Omega}_0 \cdot \hat{\Omega}^-) \left(1 - \exp\left(-\frac{\xi + |\mu|}{\xi |\mu|} \tau\right) \right), \\ T(\tau, \hat{\Omega}_0, \hat{\Omega}^+) = \lambda \frac{\xi |\mu|}{\xi - |\mu|} x_{el}(\hat{\Omega}_0 \cdot \hat{\Omega}^-) \left(\exp\left(-\frac{\tau}{|\mu|}\right) - \exp\left(-\frac{\tau}{\xi}\right) \right). \end{cases} \quad (16)$$

Формулы в однократном приближении справедливы для очень тонких слоев $\tau \ll 1$.

Рассеяние с одним «сильным» столкновением

Если в уравнении (10) исключить процесс d , то получим линейаризованное уравнение, описывающее отражение с одним «сильным» столкновением $R(\cdot)$. Запишем линейаризованное уравнение:

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\tau} R(\tau, \hat{\Omega}_0, \hat{\Omega}^-) + \frac{\xi + |\mu|}{\xi |\mu|} R(\tau, \hat{\Omega}_0, \hat{\Omega}^-) = \\ = \frac{\lambda}{4} x_{el}(\hat{\Omega}_0 \cdot \hat{\Omega}^-) + \frac{\lambda}{2} \int_{\Omega^-} x_{el}(\hat{\Omega}_0 \cdot \hat{\Omega}') R(\tau, \hat{\Omega}', \hat{\Omega}^-) \frac{d\Omega'}{\eta'} + \\ + \frac{\lambda}{2} \int_{\Omega^-} R(\tau, \hat{\Omega}_0, \hat{\Omega}') x_{el}(\hat{\Omega}' \cdot \hat{\Omega}^-) \frac{d\Omega'}{\eta'}. \end{aligned} \quad (17)$$

Для линейаризации уравнений, содержащих функцию пропускания, в уравнении (11) нужно убрать процессы c и d , а в уравнении (13) - b' и d' . Решение линейаризованного уравнения (11) будем обозначать $T^1(\cdot)$, а линейаризованного уравнения (13) - $T_1(\cdot)$. Запишем соответствующие линейаризованные уравнения:

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\tau} T^1(\tau, \hat{\Omega}_0, \hat{\Omega}^+) + \frac{1}{\xi} T^1(\tau, \hat{\Omega}_0, \hat{\Omega}^+) = \\ = \frac{\lambda}{4} e^{-\frac{\tau}{|\mu|}} x_{el}(\hat{\Omega}_0 \cdot \hat{\Omega}^-) + \frac{\lambda}{2} \int_{\Omega^+} x_{el}(\hat{\Omega}_0 \cdot \hat{\Omega}') T^1(\tau, \hat{\Omega}', \hat{\Omega}^+) \frac{d\Omega'}{\eta'}, \end{aligned} \quad (18)$$

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\tau} T_1(\tau, \hat{\Omega}_0, \hat{\Omega}^+) + \frac{1}{|\mu|} T_1(\tau, \hat{\Omega}_0, \hat{\Omega}^+) = \\ = \frac{\lambda}{4} e^{-\frac{\tau}{\xi}} x_{el}(\hat{\Omega}_0 \cdot \hat{\Omega}^+) + \frac{\lambda}{2} \int_{\Omega^+} T_1(\tau, \hat{\Omega}_0, \hat{\Omega}') x_{el}(\hat{\Omega}' \cdot \hat{\Omega}^+) \frac{d\Omega'}{\eta'}. \end{aligned} \quad (19)$$

Уравнение (18) без процессов c и d будет описывать движение электронов, которые до точки «сильного» столкновения двигаются без рассеяния, а затем многократно рассеиваются на углы меньше чем угол при «сильном» столкновении. Уравнение (19) без процессов b' и d' противоположную ситуацию: многократное рассеяние, «сильное» столкновение с последующим движением без рассеяния. В реальности оба типа движения равновероятны. Тогда функцию пропускания с одним «сильным» столкновением будем искать в виде:

$$T_1(\tau, \hat{\Omega}_0, \hat{\Omega}^+) = \frac{1}{2} (T^1(\tau, \hat{\Omega}_0, \hat{\Omega}^+) + T_1(\tau, \hat{\Omega}_0, \hat{\Omega}^+)). \quad (20)$$

Классическое квазиоднократное приближение

Так как индикатриса сильно вытянута вперед то можно перейти к *классическому квазиоднократному приближению* в уравнениях (17) - (19). После преобразований получим обыкновенные дифференциальные уравнений:

$$\left\{ \begin{aligned}
& \frac{d}{d\tau} R(\tau, \hat{\Omega}_0, \hat{\Omega}^-) + \frac{\xi + |\mu|}{\xi |\mu|} R(\tau, \hat{\Omega}_0, \hat{\Omega}^-) = \\
& = \frac{\lambda}{4} x_{el}(\hat{\Omega}_0 \cdot \hat{\Omega}^-) + \frac{\lambda}{\xi} R(\tau, \hat{\Omega}', \hat{\Omega}^-) + \frac{\lambda}{|\mu|} R(\tau, \hat{\Omega}', \hat{\Omega}^-), \\
& \frac{d}{d\tau} T^1(\tau, \hat{\Omega}_0, \hat{\Omega}^+) + \frac{1}{\xi} T^1(\tau, \hat{\Omega}_0, \hat{\Omega}^+) = \\
& = \frac{\lambda}{4} e^{-\frac{\tau}{|\mu|}} x_{el}(\hat{\Omega}_0 \cdot \hat{\Omega}^-) + \frac{\lambda}{\xi} T^1(\tau, \hat{\Omega}_0, \hat{\Omega}^+), \\
& \frac{d}{d\tau} T_1(\tau, \hat{\Omega}_0, \hat{\Omega}^+) + \frac{1}{|\mu|} T_1(\tau, \hat{\Omega}_0, \hat{\Omega}^+) = \\
& = \frac{\lambda}{4} e^{-\frac{\tau}{\xi}} x_{el}(\hat{\Omega}_0 \cdot \hat{\Omega}^+) + \frac{\lambda}{|\mu|} T_1(\tau, \hat{\Omega}_0, \hat{\Omega}^+).
\end{aligned} \right. \quad (21)$$

Решая (21) с граничными условиями (14) и учитывая (20), получим решение в классическом квазиоднократном приближении для функций отражения и пропускания:

$$\left\{ \begin{aligned}
& R(\tau, \hat{\Omega}_0, \hat{\Omega}^-) = \frac{\lambda}{4} \frac{\xi |\mu|}{\xi + |\mu|} \frac{x_{el}(\hat{\Omega}_0 \cdot \hat{\Omega}^-)}{1 - \lambda} \left[1 - \exp\left(-\frac{\xi + |\mu|}{\xi |\mu|} \tau (1 - \lambda)\right) \right], \\
& T(\tau, \hat{\Omega}_0, \hat{\Omega}^+) = \frac{\lambda x_{el}(\hat{\Omega}_0 \cdot \hat{\Omega}^+)}{8} \left[\frac{\xi |\mu|}{|\mu|(1 - \lambda) - \xi} \left(\exp\left(-\frac{\tau}{|\mu|}\right) - \exp\left(-(1 - \lambda) \frac{\tau}{\xi}\right) \right) + \right. \\
& \quad \left. + \frac{\xi |\mu|}{\xi(1 - \lambda) - |\mu|} \left(\exp\left(-\frac{1}{\xi} \tau\right) - \exp\left(-\frac{1 - \lambda}{|\mu|} \tau\right) \right) \right].
\end{aligned} \right. \quad (22)$$

Малоугловое квазиоднократное приближение

Перейдем к отысканию решений уравнений (17), (18), (19) в малоугловом квазиоднократном приближении. При решении будем учитывать, что индикатриса $x_{el}(\cos \gamma)$ имеет резкий максимум на интервале $\cos \gamma \approx 1$. Это дает возможность расширить пределы интегрирования на всю сферу $\Omega = 4\pi$.

Используем метод сферических гармоник и малоугловое приближение решения уравнений (17) - (19) разложим в виде ряда по сферическим функциям:

$$\begin{cases} R(\tau, \hat{\Omega}_0, \hat{\Omega}^-) = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{2} R_l(\tau) P_l(\hat{\Omega}_0 \cdot \hat{\Omega}^-), \\ T(\tau, \hat{\Omega}_0, \hat{\Omega}^-) = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{2} T_l(\tau) P_l(\hat{\Omega}_0 \cdot \hat{\Omega}^-). \end{cases} \quad (23)$$

Подставляя (23) в (17) - (19), используя свойство ортогональности сферических функций, в малоугловом приближении получаем для коэффициентов $R_l(\tau)$ и $T_l(\tau)$ диагональную систему обыкновенных дифференциальных уравнений:

$$\begin{cases} \frac{d}{d\tau} R_l(\tau) + \frac{\xi + |\mu|}{\xi |\mu|} R_l(\tau) = \frac{\lambda}{4} (2 - x_l) + \frac{\lambda x_l}{\xi} R_l(\tau) + \frac{\lambda x_l}{|\mu|} \frac{1}{2} R_l(\tau), \\ \frac{d}{d\tau} T_l^1(\tau) + \frac{1}{\xi} T_l^1(\tau) = \frac{\lambda}{4} e^{-\frac{\tau}{|\mu|}} x_l + \frac{\lambda x_l}{\xi} \frac{1}{2} T_l^1(\tau), \\ \frac{d}{d\tau} T_{1l}(\tau) + \frac{1}{|\mu|} T_{1l}(\tau) = \frac{\lambda}{4} e^{-\frac{\tau}{\xi}} x_l + \frac{\lambda x_l}{|\mu|} \frac{1}{2} T_{1l}(\tau). \end{cases} \quad (24)$$

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

Решая систему (24) с граничными условиями $R_l(\tau) = 0$ и $T_l(\tau) = 0$, подставляя полученное решение в (23) запишем функции отражения и пропускания в малоугловом квазиднократном приближении:

$$\left\{ \begin{aligned}
R(\tau, \hat{\Omega}_0, \hat{\Omega}^-) &= \frac{\lambda}{2} \frac{\xi |\mu|}{\xi + |\mu|} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{2} P_l(\hat{\Omega}_0 \cdot \hat{\Omega}^-) \frac{(2-x_l)}{2-\lambda x_l} \times \\
&\times \left[1 - \exp\left(-\frac{\xi + |\mu|}{\xi |\mu|} \tau \left(1 - \lambda \frac{x_l}{2}\right)\right) \right], \\
T(\tau, \hat{\Omega}_0, \hat{\Omega}^+) &= \frac{\lambda}{8} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{2} P_l(\hat{\Omega}_0 \cdot \hat{\Omega}^+) x_l \times \\
&\times \left[\frac{\xi |\mu|}{|\mu|(2-\lambda x_l)/2 - \xi} \left(\exp\left(-\frac{\tau}{|\mu|}\right) - \exp\left(-\frac{\tau}{2\xi}(2-\lambda x_l)\right) \right) + \right. \\
&\left. + \frac{\xi |\mu|}{\xi(2-\lambda x_l)/2 - |\mu|} \left(\exp\left(-\frac{\tau}{\xi}\right) - \exp\left(-\frac{\tau}{2|\mu|}(2-\lambda x_l)\right) \right) \right].
\end{aligned} \right. \quad (25)$$

Рассеяние двухслойной мишенью

Рассмотрим рассеяние двухслойной мишенью, состоящей из слоя первого материала толщиной d_1 и второго материала толщиной d_2 . В этом случае нас будет интересовать функция отражения $R_{1,2}(\tau_1, \tau_2, \hat{\Omega}_0, \hat{\Omega}^-)$ и функция пропускания $T_{1,2}(\tau_1, \tau_2, \hat{\Omega}_0, \hat{\Omega}^+)$. Если известны функции отражения и пропускания второго слоя, то искомые функции будут удовлетворять уравнениям (17) - (19) с граничными условиями:

$$\begin{aligned}
R_{1,2}(0, \tau_2, \hat{\Omega}_0, \hat{\Omega}^-) &= R_2(\tau_2, \hat{\Omega}_0, \hat{\Omega}^-), \\
T_{1,2}(0, \tau_2, \hat{\Omega}_0, \hat{\Omega}^+) &= T_2(\tau_2, \hat{\Omega}_0, \hat{\Omega}^+)
\end{aligned} \quad (26)$$

Спектр упруго-рассеянных электронов будет определяться упругими потерями в «сильных» рассеяниях. Решение в квазиднократном приближении, используя описанный выше метод, можно представить в виде:

$$\begin{cases}
R_{1,2}(\tau_1, \tau_2, \Delta, \hat{\Omega}_0, \hat{\Omega}) = G_1(\Delta, \hat{\Omega}_0 \cdot \hat{\Omega}) R_1(\tau_1, \hat{\Omega}_0, \hat{\Omega}) + \\
+ G_2(\Delta, \hat{\Omega}_0 \cdot \hat{\Omega}) \int T_{GS1}(\tau_1(1/\xi + 1/\eta), \hat{\Omega}_0 \cdot \hat{\Omega}') R_2(\tau_2, \hat{\Omega}', \hat{\Omega}) d\Omega', \\
T_{1,2}(\tau_1, \tau_2, \Delta, \hat{\Omega}_0, \hat{\Omega}) = \\
= G_1(\Delta, \hat{\Omega}_0 \cdot \hat{\Omega}) \int_{4\pi} T_1(\tau_1, \hat{\Omega}_0, \hat{\Omega}') T_{GS2}(\tau_2/\eta, \hat{\Omega}' \cdot \hat{\Omega}) d\Omega' + \\
+ G_2(\Delta, \hat{\Omega}_0 \cdot \hat{\Omega}) \int_{4\pi} T_{GS1}(\tau_1/\xi, \hat{\Omega}_0 \cdot \hat{\Omega}') T_2(\tau_2, \hat{\Omega}', \hat{\Omega}) d\Omega',
\end{cases} \quad (27)$$

где функции $R(\cdot)$ и $T(\cdot)$ рассчитываются по формулам (25), а $T_{GS}(\cdot)$ - по формуле Гаусмита и Саундерсена.

На рис. 4.4 представлены схемы рассеяния, иллюстрирующие формулу (27). Сплошным кругом показано «сильное» рассеяние, прямой линией – движение без рассеяния, ломаной – многократное рассеяние.

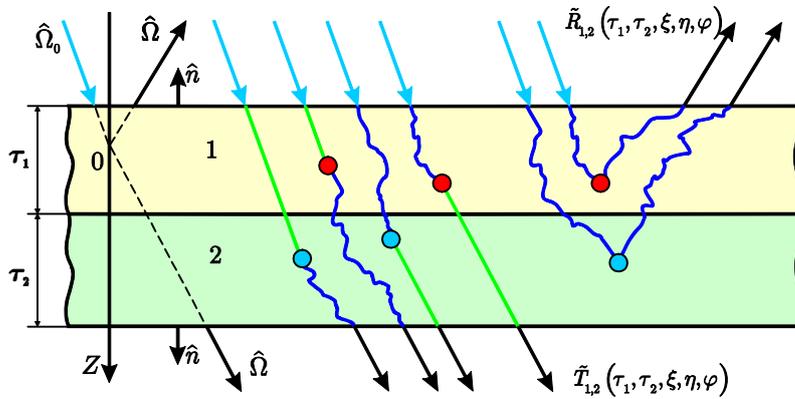


Рис. 4.4. Малоугловая квазиоднократная модель рассеяния электронов двухслойной мишенью

Подстановка (25) в (27) приводит к формулам для функций отражения и пропускания в малоугловом квазиоднократном приближении:

$$\begin{aligned}
R_{1,2}(\tau_1, \tau_2, \hat{\Omega}_0, \hat{\Omega}^-) &= \frac{\xi|\mu|}{\xi+|\mu|} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{4} P_l(\hat{\Omega}_0 \cdot \hat{\Omega}^-) \times \\
&\times \left[G_1(\Delta) \frac{\lambda_1(2-x_{1l})}{(2-\lambda_1 x_{1l})} \left(1 - \exp\left(-\frac{\xi+|\mu|}{\xi|\mu|} \tau_1 \left(1 - \lambda_1 \frac{x_{1l}}{2}\right)\right) \right) + \right. \\
&+ G_2(\Delta) \frac{\lambda_2(2-x_{2l})}{(2-\lambda_2 x_{2l})} \left(1 - \exp\left(-\frac{\xi+|\mu|}{\xi|\mu|} \tau_2 \left(1 - \lambda_2 \frac{x_{2l}}{2}\right)\right) \right) \times \\
&\quad \left. \times \exp\left(-\frac{\xi+|\mu|}{\xi|\mu|} \tau_1 \left(1 - \lambda_1 \frac{x_{1l}}{2}\right)\right) \right] \quad (28)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
T_{1,2}(\tau_1, \tau_2, \Delta, \hat{\Omega}_0, \hat{\Omega}^+) &= \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{4} P_l(\hat{\Omega}_0 \cdot \hat{\Omega}^+) \times \\
&\times \left[G_1(\Delta) \frac{\lambda_1 x_{1l} \xi \mu}{\mu(1 - \lambda_1 x_{1l}/2) - \xi} \times \right. \\
&\quad \times \left(\exp\left(-\frac{\tau_1}{\mu}\right) - \exp\left(-\left[1 - \frac{\lambda_1 x_{1l}}{2}\right] \frac{\tau_1}{\xi}\right) \right) \exp\left(-\frac{\tau_2}{\mu}\right) + \\
&\quad + G_1(\Delta) \frac{\lambda_1 x_{1l} \xi \mu}{\xi(1 - \lambda_1 x_{1l}/2) - \mu} \times \\
&\quad \times \left(\exp\left(-\frac{\tau_1}{\xi}\right) - \exp\left(-\left[1 - \frac{\lambda_1 x_{1l}}{2}\right] \frac{\tau_1}{\mu}\right) \right) \exp\left(-\left[1 - \frac{\lambda_2 x_{2l}}{2}\right] \frac{\tau_2}{\mu}\right) + \\
&\quad + G_2(\Delta) \frac{\lambda_2 x_{2l}}{\mu(1 - \lambda_2 x_{2l}/2) - \xi} \times \\
&\quad \times \left(\exp\left(-\frac{\tau_2}{\mu}\right) - \exp\left(-\left[1 - \frac{\lambda_2 x_{2l}}{2}\right] \frac{\tau_2}{\xi}\right) \right) \exp\left(-\frac{\tau_1}{\xi}\right) + \\
&\quad + G_2(\Delta) \frac{\lambda_2 x_{2l}}{\xi(1 - \lambda_2 x_{2l}/2) - \mu} \times \\
&\quad \times \left(\exp\left(-\frac{\tau_2}{\xi}\right) - \exp\left(-\left[1 - \frac{\lambda_2 x_{2l}}{2}\right] \frac{\tau_2}{\mu}\right) \right) \exp\left(-\left[1 - \frac{\lambda_1 x_{1l}}{2}\right] \frac{\tau_1}{\xi}\right) \Big].
\end{aligned} \tag{29}$$

Интерпретация экспериментов по упругому рассеянию электронов от двухслойных мишеней

С помощью формул (28) и (29) в лабораторной работе интерпретируются экспериментальные спектры упруго-рассеянных электронов от двухслойных мишеней [1]: золото на углероде и углерод на золоте. В экспериментах [1] были использованы два типа мишеней, различающихся толщиной слоя углерода: 1) $d_c = 10$ нм,

2) $d_C = 160$ нм. Толщина золотого слоя для всех мишеней постоянна $d_{Au} = 0.2$ нм. Начальная энергия электронов $E_0 = 40$ кэВ. Спектры были сняты в различных геометриях:

- (a) Угол падения равен 67.7° от нормали к верхней границе, полярный угол визирования лежит в плоскости падения и равен 67.7° от нормали к верхней границе, а азимутальный угол визирования - 180° . Мишень: сверху слой углерода, снизу слой золота. Спектр отраженных электронов. В дальнейшем будем обозначать: (a) reflection C/Au.
- (b) Угол падения - 22.3° , полярный угол визирования - 66.9° от нормали к нижней границе, азимутальный угол визирования - 0° . Мишень: сверху слой золота, снизу слой углерода. Спектр прошедших электронов. Обозначение: (b) transmission Au/C.
- (c) Угол падения - 0° , полярный угол визирования - 44.6° от нормали к нижней границе, азимутальный угол визирования - 0° . Мишень: сверху слой золота, снизу слой углерода. Спектр прошедших электронов. Обозначение: (c) transmission Au/C.
- (d) Угол падения - 22.3° , полярный угол визирования - 22.3° от нормали к нижней границе, азимутальный угол визирования - 180° . Мишень: сверху слой золота, снизу слой углерода. Спектр прошедших электронов. Обозначение: (d) transmission Au/C.
- (e) Угол падения - 22.3° , полярный угол визирования - 22.3° от нормали к нижней границе, азимутальный угол визирования - 180° . Мишень: сверху слой углерода, снизу слой золота. Спектр прошедших электронов. Обозначение: (e) transmission C/Au.
- (f) Угол падения - 0° , полярный угол визирования - 44.6° от нормали к нижней границе, азимутальный угол визирования - 0° . Мишень: сверху слой углерода, снизу слой золота. Спектр прошедших электронов. Обозначение: (f) transmission C/Au.
- (g) Угол падения - 22.3° , полярный угол визирования - 66.9° от нормали к нижней границе, азимутальный угол визирования - 0° . Мишень: сверху слой углерода, снизу слой золота. Спектр прошедших электронов. Обозначение: (g) transmission C/Au.

(h) Угол падения - 67.7° , полярный угол визирования - 67.7° от нормали к верхней границе, азимутальный угол визирования - 180° . Мишень: сверху слой золота, снизу слой углерода. Спектр отраженных электронов. Обозначение: (a) reflection Au/C.

Интенсивность пика (площадь под пиком) упруго-рассеянных электронов от золота обозначим $S_{Au}(\cdot)$, а от углерода - $S_C(\cdot)$. Тогда формулы (28) - (29) можно представить в виде:

$$\begin{aligned}
 Y_{Au,C}(\tau_{Au}, \tau_C, \Delta, \hat{\Omega}_0, \hat{\Omega}) &= \\
 &= G_{Au}(\Delta) S_{Au}(\tau_{Au}, \tau_C, \hat{\Omega}_0, \hat{\Omega}) + \\
 &\quad + G_C(\Delta) S_C(\tau_{Au}, \tau_C, \hat{\Omega}_0, \hat{\Omega}),
 \end{aligned}
 \tag{30}$$

где $Y(\cdot)$ либо функция отражения $R(\cdot)$, либо функция пропускания $T(\cdot)$, рассчитанные в соответствующей модели.

Основной проблемой, при расчете относительной толщины $\tau = n_0(\sigma_{el} + \sigma_{in})d$, является то, что концентрации атомов n_0 для тонких пленок не известны. Например, толщина слоя золота меньше чем среднее расстояние между атомами в полубесконечной мишени $l_0 = 1/\sqrt[3]{n_0}$ (для золота $l_0 = 0.389$ нм). В этом случае слой золота на углероде имеет неоднородную структуру, а величина толщины $d_{Au} = 0.2$ нм имеет смысл средней по мишени. Кроме того толщина слоя зависит от условий роста пленок. Следует ожидать, что неоднородности пленки золота на тонком и толстом слое углерода будут различны. Таким образом, величину n_{0Au} и соответственно τ_{Au} для золота будем считать подгоночным параметром.

Подготовка к лабораторной работе

1. Изучить теоретические основы лабораторной работы.
2. Изучить закономерности формирования пика упруго рассеянных электронов.
3. Подготовить, в соответствии с [1], исходные данные по расчету спектров упруго рассеянных электронов.
4. Подготовить программу расчета спектров упруго рассеянных электронов в малоугловом квазиоднократном приближении.

Порядок выполнения лабораторной работы

1. Получить у преподавателя расчетное задание.
2. Ввести в программу исходные данные, выбрать модельную индикатрису и приближение, по которым будут энергетические спектры упруго рассеянных электронов, 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. Какими параметрами характеризуется спектр упруго-рассеянных электронов от одного типа атомов?
2. Запишите уравнения Льюиса-Спенсера.
3. Сформулируйте принцип инвариантности.
4. Напишите формулу для функции отражения и пропускания в однократном приближении.
5. Чем отличается классическое квазиоднократного приближения от малоуглового?