

МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
имени М.В. ЛОМОНОСОВА

На правах рукописи

Лобанова Лидия Григорьевна

Электронная спектроскопия и спектроскопия рассеяния легких ионов низких энергий в задачах выбора материалов, обращенных к плазме

1.3.5. Физическая электроника

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Москва – 2026

Диссертация подготовлена на кафедре общей физики и ядерного синтеза «Национального исследовательского университета «МЭИ»

- Научный руководитель** – *Афанасьев Виктор Петрович, доктор физико-математических наук, доцент*
- Официальные оппоненты** – *Борисов Анатолий Михайлович, доктор физико-математических наук, профессор, Московский авиационный институт (национальный исследовательский университет), институт №12 «Аэрокосмические, наукоёмкие технологии и производства», кафедра 1203 «Технологии производства приборов и информационных систем управления летательных аппаратов», профессор*
- Гайнуллин Иван Камилевич, доктор физико-математических наук, доцент, МГУ имени М.В. Ломоносова, физический факультет, кафедра физической электроники, доцент*
- Крат Степан Андреевич, кандидат физико-математических наук, Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», институт лазерных и плазменных технологий, лаборатория физико-химических процессов в стенках термоядерных установок, старший научный сотрудник*

Защита диссертации состоится 21 апреля 2026 г. в 17 часов 00 минут на заседании диссертационного совета МГУ.013.7 Московского государственного университета имени М.В. Ломоносова по адресу: 119991, Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 2, Физический факультет МГУ, ауд. Н-16.

E-mail: diss.sov.013.7@org.msu.ru

С диссертацией можно ознакомиться в отделе диссертаций научной библиотеки МГУ имени М.В. Ломоносова (Ломоносовский просп., д. 27) и на портале: <https://dissovet.msu.ru/dissertation/3831/>

Автореферат разослан 20 марта 2026 г.

Ученый секретарь
диссертационного совета,
кандидат физико-математических наук

И.Н. Карташов

Общая характеристика работы

Актуальность темы исследования. Знание процессов и последствий взаимодействия потоков заряженных частиц с материалами необходимо для решения проблем, возникающих во многих областях современной науки и техники [1]. Создание современных технологий, таких как, модифицирование и легирование поверхности, имплантация, ионное перемешивание и т.д. [2] базируется на процессах взаимодействия потоков заряженных частиц с материалами. Для решение указанных задач необходимо располагать точными количественными методами их описания. Получение исчерпывающей информации о последствиях процессов взаимодействия потоков заряженных частиц с твердым телом является одной из задач при создании перспективных энергетических установок – так называемая проблема «первой стенки» [3]. Исследования в области биомедицины, микро и нано-электроники нуждаются в наличии точных методов контроля качественного и количественного состава материалов.

Проблема «первой стенки» является одной из наиболее сложных инженерных задач, стоящей на пути реализации управляемого термоядерного синтеза (УТС). Проблема включает в себя анализ воздействия высокотемпературной плазмы на конструкционные материалы, а именно, отражение и внедрение потоков легких ионов и электронов в материалы твердого тела, исследование структуры материалов, подверженных плазменной обработке. Количественное описание процессов рассеяния потоков легких ионов и электронов позволяет однозначно устанавливать причины разрушения внутрикамерных материалов современных термоядерных устройств. Особое значение имеет «третья проблема», для решения которой в настоящей диссертации предлагается оригинальный метод послойного анализа изотопов водорода с помощью методов электронной спектроскопии. Существуют различные теории, используемые для описания указанных процессов: аналитические – метод прямолинейных траекторий [3], теории двух, трех и более кратного рассеяния [4], теория Фирсова [5], теория Бете [6]; методы компьютерного моделирования [7] – программы TRIM, SRIM, SCATTER, QUASES, SESSA, Casa XPS. Методы численного описания процессов электронного взаимодействия с твердым телом базируются на базах данных, погрешность которых не превышает 5-10% [8]. Методы описания ионного взаимодействия с твердым телом базируются на данных, погрешность которых может достигать сотен процентов [8]. Вследствие этого численные методы описания ионного рассеяния включают множество не имеющих физического смысла подгоночных параметров, позволяющих согласовать расчеты с экспериментальными данными.

Контроль за послойными профилями конструкционных материалов, подвергшихся воздействию водородной плазмы, в основном выполняется на основе использования метода ядерных реакций (Nuclear Reaction Analysis – NRA)

и метода быстрых атомов отдачи (Elastic Recoil Detection – ERD) [9,10], обладающих рядом значительных недостатков: относительно высокая стоимость реализации (необходимость наличия ускорителей с энергиями в несколько МэВ), разрушающая природа методов, отсутствие обоснованных и апробированных методик расшифровки сигналов эксперимента, невозможность одновременно фиксировать изотопы водорода в мишени.

Наиболее успешно применяемые сегодня для исследования твердых тел методики, основанные на анализе сигналов различных видов электронной спектроскопии, можно использовать для решения широкого круга задач, отмеченных выше. Например, спектроскопия пиков упруго отраженных электронов – СПУОЭ [11] открывает возможности исследования послонных профилей изотопов водорода и гелия в конструкционных материалах на глубинах, не превышающих среднюю длину свободного неупругого пробега частиц. Методы расшифровки энергетических спектров СПУОЭ отработаны только для однокомпонентных материалов [12], что определяет необходимость обобщения этих методов для анализа многокомпонентных образцов. Для определения послонных профилей исследуемых компонент в твердом теле на больших глубинах возможно использование спектроскопии отраженных электронов – СОЭ [13], информационная глубина которой равна транспортной длине пробега частиц, что в некоторых случаях достигает микронных размеров. Однако, СОЭ анализ нуждается в создании методик и программных продуктов, которыми может пользоваться широкий круг исследователей, не знающих тонкостей процессов многократного рассеяния электронов в веществе.

Наиболее широко применяемым для анализа твердых тел является метод рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии – РФЭС [14]. В настоящее время созданы методы анализа РФЭС сигналов, ограничивающиеся исследованием энергетических пиков, сформированных фотоэлектронами, вышедшими в вакуум без неупругих потерь энергии – X-ray Photoelectron Spectra (XPS) или Peak Shape Analysis (PSA) [14]. XPS метод описания РФЭС сигнала позволяет проводить компонентный анализ исследуемого материала на глубинах, не превышающих среднюю длину свободного неупругого пробега электронов, которая обычно составляет несколько нанометров. Осуществление послонного анализа с помощью XPS метода невозможно, т.к., как показано в [15], XPS подход сталкивается с проблемой неадекватного решения некорректной математической задачи. Для осуществления послонного, компонентного и аллотропного исследования материалов как в приповерхностной области, так и в массиве материала необходимо анализировать широкую область потерь энергии фотоэлектронов, примыкающей к пику, т.е. осуществлять Photo Electron Spectra Analysis – PES анализ [16]. В настоящее время широко доступных методик и программных продуктов, позволяющих проводить PES анализ, не существует.

В настоящей диссертационной работе разработана аналитическая теоретическая модель отражения легких ионов от поверхности твердых тел. Теоретическая модель позволяет определять энергетические и угловые спектры отраженных легких ионов, полные коэффициенты отражения частиц и энергии.

Теоретическая модель справедлива для легких ионов с энергией от сотен эВ до десятков кэВ, т.е. в тех ситуациях, когда остаточный пробег легких ионов в мишени соизмерим, либо больше транспортной длины пробега в мишени. Теоретическая модель не ограничена величинами углов детектирования и рассеяния ионов. Основой количественных расчетов на базе созданной теоретической модели являются два безразмерных параметра – параметр экранирования и отношение остаточного пробега к транспортной длине пробега ионов.

Разработана и апробирована количественная методика расчета интенсивностей пиков электронов, упруго отраженных от многокомпонентных мишеней, что является основой расшифровки сигналов энергетических спектров СПУОЭ и высокоточного определения послойных профилей изотопов водорода и гелия в многокомпонентных мишенях. Построена методика расчета спектров СОЭ для слоисто-неоднородных мишеней. Разработана и апробирована малоугловая методика расчета энергетических спектров РФЭС в широком интервале потерь энергии.

Разработанные методики позволили: определить послойные профили водорода и дейтерия в углеводородах и бериллии, имплантированном дейтерием; исследовать малоугловое отражение легких ионов от различных однородных и слоисто-неоднородных материалов; проанализировать угловые распределения отраженных легких ионов как для случая измерения отраженных легких ионов, так и для суммарного по зарядовым фракциям отраженного потока; однозначно определить аллотропную форму углерода при исследовании алмазоподобных покрытий; исследовать изменение аллотропного вида углерода при взаимодействии графита марки МПГ-8 с гелиевой плазмой на установке ПЛМ; исследовать изменение электронной структуры вольфрама в результате взаимодействия с гелиевой плазмой на установке ПЛМ; исследовать явление образования алмазоподобных покрытий на графитовых материалах, используемых в токамаке EAST.

Степень разработанности темы. Проблема «первой стенки» является наиболее актуальной проблемой установок УТС. Выбор материала первой стенки требует знаний о процессах взаимодействия плазмы с твердым телом, а именно процессы отражения и внедрения потоков легких ионов и электронов в твердое тело. Для прогнозирования и описания взаимодействия плазмы со стенкой необходимо иметь точные методы. В настоящее время данные процессы описываются с помощью компьютерного моделирования, например, программы SRIM, TRIM, SCATTER, OKSANA, SPIM-L и др. Аналитическое описание ограничено в основном использованием приближения прямолинейных траекторий. Аналитическая теория О. Б. Фирсова справедлива лишь в случае скользящего рассеяния частиц. Теория Г. Бете, справедливая в случае зондирования частиц мишени по нормали к поверхности, дает качественные, но не количественные результаты. Не существует аналитической теории, способной описать эти процессы в широком интервале энергии зондирующего пучка ионов и для любой геометрии рассеяния.

Проблема «первой стенки» включает также задачу определения профилей легких ионов, внедренных из плазмы в твердое тело. Традиционно используемые для этих задач метод ядерных реакций и метод быстрых атомов отдачи обладают рядом серьезных недостатков, таких как, разрушающая природа методов, высокая стоимость реализации, отсутствие апробированных методик расшифровки данных. Долгое время считалось, что с помощью электронной спектроскопии невозможно определение водорода и гелия, однако, спектроскопия пиков упруго отраженных электронов и спектроскопия отраженных электронов сняли это ограничение. Данные методы обладают рядом преимуществ, такие как неразрушающая природа методов, простота и относительно невысокая стоимость экспериментальной реализации, однако, существуют сложности в количественной расшифровке данных. Существующие в настоящий момент методы расшифровки данных СПУОЭ и СОЭ основаны, в основном, на компьютерном моделировании. Существует аналитическое описание для однокомпонентных мишеней. Однако, практически необходимым является описание отражения электронов от многокомпонентных мишеней. Отметим, что практически все экспериментальные стенды, имитирующие процессы взаимодействия конструкционных материалов с интенсивными потоками энергий, работают на электронных пучках.

Наиболее широко используемым методом анализа поверхности твердого тела на сегодняшний день является метод рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии. Как и в методах СПУОЭ и СОЭ в методе РФЭС существует проблема расшифровки данных. Традиционно используемый метод анализ пиков – Peak Shape Analysis не способен получить данные о послойных профилях исследуемых образцов, а также не способен идентифицировать различные аллотропные разновидности исследуемого материала. Наиболее актуальной эта задача является в исследовании углеродных и углеродосодержащих материалов, что имеет непосредственную практическую значимость в задачах УТС, в биомедицине, в микро и нано-электронике.

Цель диссертационного исследования. Целью является развитие количественных методов электронной спектроскопии и спектроскопии рассеяния легких ионов низких энергий для исследования поверхности материалов сложного состава, в том числе материалов, обращенных к термоядерной плазме.

Для достижения указанной цели в рамках настоящей работы были поставлены и решены следующие **задачи**:

1. Решение граничной задачи для уравнения упругого переноса легких ионов и электронов в твердом теле методом инвариантного погружения. Определение распределения отраженных частиц по длине пробега в мишени. Апробация полученного решения на основе сравнения с данными компьютерного моделирования. Описание процесса многократных неупругих потерь энергии легких ионов на основе модели Фоккера-Планка. Описание процесса многократных неупругих потерь энергии электронов на основе решения Ландау;

2. Определение энергетических и угловых распределений, коэффициентов отражения энергии и частиц для отражения легких ионов. Апробация полученных

результатов на основе сравнения с экспериментальными данными и данными компьютерного моделирования;

3. Построение количественной методики расшифровки сигнала спектроскопии пиков упруго отраженных электронов и спектроскопии отраженных электронов для многокомпонентных мишеней. Апробация разработанных методик на основе расчета послойных профилей изотопов водорода в углеводородных и бериллиевых мишенях;

4. Решение граничной задачи с внутренними источниками для определения плотности потока вышедших в вакуум фотоэлектронов. Получение решения в рамках малоуглового приближения. Апробация полученного решения на основе сравнения с экспериментальными данными и данными компьютерного моделирования. Построение методики расчета энергетических спектров фотоэлектронов в широкой области потерь энергии (0-100 эВ) – Photoelectron spectra analysis метод (PES метод). Определение компонентного, химического и аллотропного состава поверхности материалов, подвергшейся воздействию термоядерной плазмы, с помощью расшифровки сигналов рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии на основе PES метода;

5. Построение методики восстановления дифференциального сечения неупругого рассеяния электронов из экспериментальных спектров рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии. Исследование изменения аллотропной формы углеродных и вольфрамовых материалов, подверженных воздействию термоядерной плазмы, на основе разработанных методик расшифровки сигналов рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии.

Объектом исследования являются процессы взаимодействия потоков легких ионов и электронов и термоядерной плазмы с твердыми телами и методы анализа материалов на основе электронной спектроскопии.

Предметом исследования являются дифференциальные (энергетические и угловые распределения) и интегральные (коэффициенты отражения энергии и частиц) характеристики рассеяния частиц; аналитические методы расшифровки сигналов электронной спектроскопии (спектроскопия пиков упруго отраженных электронов, спектроскопия отраженных электронов, рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия); динамика изменения свойств конструкционных материалов (компонентный и химический состав, аллотропная форма, послойное содержание изотопов водорода).

Научная новизна работы заключается в следующем:

1. Впервые разработана аналитическая теоретическая модель описания процессов многократного рассеяния легких ионов от твердых тел. Данная теоретическая модель справедлива для широкого интервала энергии зондирующего пучка легких ионов (от сотен эВ до десятков кэВ) и для любой геометрии рассеяния. Особенностью данной теоретической модели является ее применимость для описания процесса рассеяния в случае, когда остаточный пробег легких ионов соизмерим с транспортной длиной пробега. Построенная теоретическая модель с точностью приведенных в современной литературе данных по параметрам рассеяния легких ионов от твердых тел позволяет описать

интегральные (полные коэффициенты отражения энергии и частиц) и дифференциальные (энергетические и угловые распределения) характеристики рассеяния.

2. Разработана методика расчета интенсивностей пиков электронов, упруго отраженных от многокомпонентных мишеней, позволяющая учитывать процесс многократного упругого рассеяния электронов в твердом теле. Методика основана на решении граничной задачи для уравнения упругого переноса электронов методом инвариантного погружения. Данная методика позволяет определять послойные профили изотопов водорода в твердых телах. Определение послойных профилей исследуемой мишени строится на основе решения обратной задачи рассеяния электронов в твердом теле путем многократного решения прямой задачи.

3. Разработана методика описания энергетических спектров спектроскопии отраженных электронов для многокомпонентных мишеней, позволяющая выполнять послойный анализ мишеней сложного состава. Методика основана на решении граничной задачи упругого рассеяния методом инвариантного погружения; энергетические спектры получены методом парциальных интенсивностей.

4. Разработана методика расчета энергетических спектров фотоэлектронов в интервале потерь энергии, включающим как пик, сформированный фотоэлектронами, вышедшими в вакуум без неупругих потерь энергии, так и область потерь энергии размером порядка 100 эВ. Методика основана на решении граничной задачи для уравнения упругого переноса фотоэлектронов в твердом теле с внутренними источниками методом инвариантного погружения. Энергетические спектры фотоэлектронов получены методом парциальных интенсивностей. Данная методика позволяет анализировать аллотропный состав исследуемых твердых тел.

Теоретическая значимость работы заключается в следующем:

1. В работе разработана последовательная аналитическая теоретическая модель отражения легких ионов от твердых тел. Данная теоретическая модель позволяет определять такие характеристики отражения легких ионов, как энергетические и угловые распределения, коэффициенты отражения частиц и энергии.

2. В работе разработана количественная методика описания сигналов методов анализа поверхности, основанных на электронном рассеянии, а именно, спектроскопия пиков упруго отраженных электронов и спектроскопия отраженных электронов. Данная количественная методика позволяет с высокой точностью описать как отражение электронов от однородных однокомпонентных мишеней, так и от слоисто-неоднородных многокомпонентных мишеней.

3. В работе разработана количественная методика описания энергетических спектров рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии, включающих как пик, сформированный фотоэлектронами, вышедшими в вакуум без неупругих потерь энергии, так и область потерь энергии размером порядка 100 эВ. Данная методика позволяет с высокой скоростью и точностью решать обратные задачи рассеяния

фотоэлектронов в твердых телах на основе многократного решения прямой задачи.

Практическая значимость работы заключается в следующем:

1. Разработанная в работе аналитическая теоретическая модель отражения легких ионов от твердых тел позволит решить проблему «первой стенки» множества перспективных энергетических установок, а конкретнее, описать энерговыделение в «первой стенке» установок для реализации УТС, проанализировать и спрогнозировать коррозию материалов «первой стенки». Данная теоретическая модель является отличным инструментом количественного описания сигналов методов анализа поверхности, основанных на зондировании мишени пучками легких ионов.

2. Разработанная в работе количественная методика описания сигналов спектроскопии пиков упруго отраженных электронов и спектроскопии отраженных электронов позволяет определять как компонентный, так и изотопный состав исследуемого материала на глубинах порядка нескольких нанометров, так и компонентный состав на глубинах порядка нескольких микрон, а также реализовать послойный анализ исследуемого тела. Важной особенностью представленных методов анализа является возможность определять изотопы водорода и гелия.

3. Разработанная в работе количественная методика расшифровки сигнала рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии позволяет с высокой точностью определять компонентный, аллотропный и послойный профиль исследуемых твердых тел.

Исследования в области электронной спектроскопии представляют интерес для энергетической области промышленности (решение проблемы «первой стенки»), микро и нано-электроники (осуществление контроля процесса создания процессоров), биомедицине (исследование углеводов и др.).

Методология диссертационного исследования. Базовым методом решения задач, поставленных в диссертационной работе, является метод инвариантного погружения Амбарцумяна, который позволил точно решить граничные задачи для уравнения переноса. Для упрощения полученных уравнений было применено упрощение, называемое малоугловым приближением, основывающимся на том факте, что дифференциальные сечения упругого рассеяния электронов и легких ионов имеют резкий максимум в области малых углов рассеяния. Полученное нелинейное уравнение допускает точное численное решение, которое позволило определить степень применимости малоуглового приближения. Необходимость упрощения исходных уравнений связана с тем фактом, что решаются обратные задачи, некорректные с математической точки зрения. Наиболее эффективным методом решения обратных задач является метод подбора, т.е. многократное решение прямой задачи, для чего необходимо иметь точное и быстрое решение. Малоугловое приближение позволило перейти от решения уравнений типа Риккати к уравнениям типа Ляпунова. Дальнейшее аналитическое решение упругих задач строилось с использованием метода сферических гармоник и процедуры аналитического продолжения.

Положения, выносимые на защиту.

1. Аналитическая теоретическая модель отражения легких ионов от твердых тел, базирующаяся на решении граничной задачи для уравнения упругого переноса методом инвариантного погружения, с высокой точностью описывает дифференциальные и интегральные характеристики рассеяния легких ионов с энергией в интервале от сотен до нескольких тысяч эВ;

2. Количественный метод расшифровки сигнала спектроскопии пиков упруго отраженных электронов, построенный на основе решения граничной задачи для уравнения упругого переноса электронов методом инвариантного погружения с учетом вклада процесса многократного упругого рассеяния, позволяет определять послойные профили изотопов водорода с содержанием в исследуемой мишени на уровне 10%;

3. Метод расшифровки энергетических спектров отраженных электронов, построенный на основе решения граничной задачи для уравнения упругого переноса с применением оригинальной методики аналитического продолжения, позволяет количественно описывать результаты спектроскопии отраженных электронов как для однородных, так и слоисто-неоднородных мишеней;

4. Аналитическая теоретическая модель рассеяния фотоэлектронов в твердых телах, построенная на основе решения граничной задачи с внутренними источниками для уравнения упругого переноса, позволяет расшифровывать энергетические спектры рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии в широком интервале потерь энергии фотоэлектронов, т.е. позволяет реализовывать Photo Electron Spectra (PES) анализ;

5. В результате воздействия стационарной гелиевой плазмы на плазменной линейной установке (ПЛМ) образующиеся наноструктуры вольфрамовый «пух» имеют идентичную электронную структуру, что и исходный вольфрам, а поверхность графита марки МПГ-8 переходит в структуру пиролитического графита; под действием дейтериевой плазмы токамака EAST на графите марки АТJ образуются алмазоподобные покрытия.

Степень достоверности полученных результатов. Достоверность результатов обеспечивается отсутствием противоречий между полученными результатами и имеющимися экспериментальными и теоретическими литературными данными по тематике диссертации в тех случаях, когда такие данные имеются; использованием стандартных специализированных программных пакетов TRIM и SRIM для моделирования процессов взаимодействия ионов с веществом, воспроизводящих реальные эксперименты, а также согласованностью результатов, полученных при помощи различных аналитических методов.

Публикации. Основные результаты диссертационной работы опубликованы в 12 статьях в рецензируемых научных изданиях, рекомендованных для защиты в диссертационном совете МГУ по специальности и отрасли наук.

Апробация результатов. Основные результаты диссертации были доложены на 30 международных конференциях:

1. 6th European Conference on Plasma Diagnostics (ECPD); Прага, Чехия, 2025.

2. XXV, XXVI, XXVII Международных конференциях «Взаимодействие ионов с поверхностью – ВИП»; Москва/Ярославль/Рязань, Россия, 2021, 2023, 2025.

3. 50, 51, 52, 53, 54 Международных Тулиновских конференциях по физике взаимодействия заряженных частиц с кристаллами; Москва, Россия, 2021, 2022, 2023, 2024, 2025.

4. XVII, XVIII, XIX, XXI Международных научно-технических конференциях «Быстрозакаленные материалы и покрытия»; Москва, Россия, 2020, 2021, 2022, 2024.

5. 14, 15 Международных конференциях “Микро- и наноэлектроника” – ICMNE; Звенигород, Россия, 2021, 2023.

6. VIII, IX Международных конференциях «Лазерные, плазменные исследования и технологии – ЛаПлаз»; Москва, Россия, 2022, 2023.

7. I, LI, LII Международных Звенигородских конференциях по физике плазмы и управляемому термоядерному синтезу; Звенигород, Россия, 2023, 2024, 2025.

8. XXVI, XXVII, XXVIII научных конференциях «Взаимодействие плазмы с поверхностью»; Москва, Россия, 2023, 2024, 2025.

9. III Международной конференции «Проблемы термоядерной энергетики и плазменные технологии»; Таруса, Россия, 2023.

10. XXIX, XXX Международных конференциях студентов, аспирантов и молодых ученых по фундаментальным наукам «Ломоносов»; Москва, Россия, 2022, 2023.

11. XVII Курчатовской молодежной научной школе; Москва, Россия, 2023.

12. 27, 28 Международных научно-технических конференциях студентов и аспирантов «Радиоэлектроника, Электротехника и Энергетика»; Москва, Россия, 2021, 2022.

13. III Международной конференции «Современные проблемы теплофизики и энергетики»; Москва, Россия, 2020.

Личный вклад автора в получение результатов заключается в следующем: постановке цели и задач исследования; разработке аналитической теоретической модели расчета энергетических и угловых распределений отраженных легких ионов, коэффициентов отражения частиц и энергии, распределений отраженных легких ионов, электронов и фотоэлектронов по длине пробега; методики расшифровки энергетических спектров отраженных электронов с целью получения послойных профилей и спектров рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии с целью определения химического состава и аллотропных разновидностей исследуемых материалов; методики расшифровки сигналов спектроскопии пиков упруго отраженных электронов и программная реализация всех указанных методик; анализе поведения интегральных и дифференциальных характеристик отражения легких ионов в твердом теле в зависимости от энергии зондирующего пучка ионов и геометрии рассеяния; проведении расчетов интегральных и дифференциальных характеристик отражения легких ионов от твердых тел, расчетов послойных профилей протия и дейтерия в углеводородных

и бериллиевых образцах, расчетов энергетических спектров электронов, отраженных от однородных однокомпонентных и слоисто-неоднородных многокомпонентных мишеней, описания спектров рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии для углеродных и вольфрамовых мишеней, реализации процедуры восстановления дифференциального сечения неупругого рассеяния электронов в различных аллотропных формах углерода; формулировании выводов диссертационной работы; обобщении результатов работы; разработке положений, выносимых на защиту.

Структура и объём диссертации. Диссертация состоит из введения, 5 глав и заключения, а также списка литературы. Объём диссертации составляет 192 страницы печатного текста, включающие 79 рисунков и библиографию из 177 наименований.

Основное содержание работы

Во введении обоснована актуальность темы исследования, представлена степень разработанности, приведены цели и задачи диссертационного исследования, объекты и предмет исследования, научная новизна работы, показана теоретическая и практическая значимость работы, обоснованы методология и методы исследования, представлены выносимые на защиту положения, приведена информация об апробации работы и личном вкладе автора.

В первой главе приведен обзор аналитических методик, используемых для описания процессов отражения электронов и легких ионов от поверхности твердых тел. Приведены условия, при которых каждая из представленных методик дает удовлетворительные качественные или количественные результаты. Приведен обзор методов анализа послойных профилей изотопов водорода в твердых телах. Приведены методики расшифровки энергетических спектров рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии.

Вторая глава содержит введение в теорию переноса электронов и легких ионов в твердых телах. Представлен вывод уравнений упругого и неупругого переноса электронов и легких ионов в твердых телах. Представлено решение граничной задачи для уравнения упругого переноса электронов и легких ионов в твердых телах, полученное методом инвариантного погружения Амбарцумяна [17]:

$$\begin{aligned} \left(\frac{1}{\mu_0} + \frac{1}{\mu}\right) \left(1 + \frac{\partial}{\partial \tau}\right) R(\tau, \mu_0, \mu, \varphi_0, \varphi) = x_{el}(\mu_0, \mu, \varphi_0, \varphi) \delta(\tau) + \\ \int_0^{2\pi} d\varphi' \int_{-1}^0 R(\tau, \mu_0, \mu', \varphi_0, \varphi') x_{el}(\mu', \mu, \varphi', \varphi) \frac{d\mu'}{\mu'} + \\ \int_0^{2\pi} d\varphi' \int_0^1 x_{el}(\mu_0, \mu', \varphi_0, \varphi') R(\tau, \mu', \mu, \varphi', \varphi) \frac{d\mu'}{\mu'} + \\ \int_0^{2\pi} d\varphi' \int_0^{2\pi} d\varphi'' \int_0^1 \frac{d\mu'}{\mu'} \int_{-1}^0 R(\tau, \mu_0, \mu'', \varphi_0, \varphi'') x_{el}(\mu'', \mu', \varphi'', \varphi') R(\tau, \mu', \mu, \varphi', \varphi) \frac{d\mu''}{\mu''}, \end{aligned} \quad (1)$$

где R – функция отражения частиц; μ_0, μ – косинус полярного угла падения и отражения зондирующего пучка частиц соответственно; τ – пробег частиц в мишени, выраженный в единицах свободного упругого пробега; φ_0, φ – азимутальные углы падения и отражения соответственно; x_{el} – нормированное на единицу дифференциальное сечение упругого рассеяния частиц.

Аналитическое решение граничной задачи упругого рассеяния, описывающее распределение отраженных частиц по длине пробега в мишени, получено в малоугловом приближении с помощью метода сферических гармоник с применением процедуры аналитического продолжения:

$$R(\tau, \mu_0, \mu, \varphi_0, \varphi) = \frac{\mu_0|\mu|}{\mu_0+|\mu|} \frac{1}{\tau} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{2} P_l(\mu_0\mu + \sqrt{1-\mu_0^2}\sqrt{1-\mu^2} \cos(\varphi_0 - \varphi)) [e^{-(1-x_l)\tau} - e^{-\tau}], \quad (2)$$

где x_l – коэффициенты разложения x_{el} в ряд по полиномам Лежандра P_l .

Представлено сравнение результатов расчета распределения отраженных легких ионов по длине пробега на основе решения (2) с традиционно используемыми методами описания отражения легких ионов – приближением прямолинейных траекторий и диффузионным приближением. Показана несостоятельность традиционно используемых решений для описания отражения легких ионов с энергией в интервале от сотен эВ до десятков кэВ – энергий, актуальных для установок управляемого термоядерного синтеза. Продемонстрировано высокое качество описания распределения отраженных протонов по длине пробега на основе сравнения результатов, полученных по формуле (2), с результатами компьютерного моделирования (рис. 1).

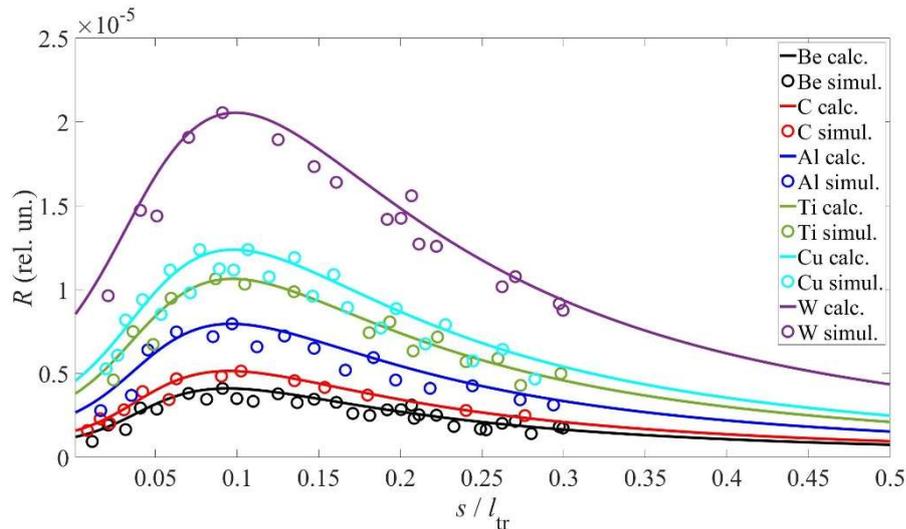


Рис. 1. Распределение отраженных протонов по длине пробега в мишени. $E_0 = 10$ кэВ. Угол падения 80° , угол рассеяния 30°

Третья глава [A1, A2, A6] посвящена построению аналитической методики описания энергетических и угловых распределений электронов, отраженных от однородных однокомпонентных и слоисто-неоднородных многокомпонентных твердых тел. Получено решение граничной задачи для уравнения неупругого переноса или решение Ландау [18], описывающее распределение по потерям энергии электронов, прошедших путь τ в мишени. Энергетические спектры отраженных электронов получены путем свертки решения граничной задачи для уравнения упругого переноса (2) и решения Ландау – методом парциальных интенсивностей [19]:

$$R(\Delta, \mu_0, \mu, \varphi_0, \varphi) = C_0 \delta(\Delta) + C_1 x_{in}(\Delta) + C_2 x_{in}^2(\Delta) + \dots + C_k x_{in}^k(\Delta) + \dots, \quad (3)$$

$$C_0 = -\frac{\mu_0|\mu|}{\mu_0+|\mu|} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{2} P_l(\mu_0\mu + \sqrt{1-\mu_0^2}\sqrt{1-\mu^2} \cos(\varphi_0 - \varphi)) \ln(1 - \lambda x_l), \quad (4)$$

$$C_k = \frac{\mu_0|\mu|}{\mu_0+|\mu|} \frac{(1-\lambda)^k}{k} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{2} P_l(\mu_0\mu + \sqrt{1-\mu_0^2}\sqrt{1-\mu^2} \cos(\varphi_0 - \varphi)) \left(\frac{1}{(1-\lambda x_l)^k} - 1 \right), \quad (5)$$

где $x_{in}(\Delta)$ – дифференциальное сечение неупругого рассеяния электронов; λ – альбеда упругого рассеяния или вероятность однократного упругого рассеяния.

Представлена количественная методика расшифровки сигнала спектроскопии пиков упруго отраженных электронов (СПУОЭ), позволяющая определять содержание изотопов водорода в мишени. Проанализировано влияние процесса многократного упругого рассеяния на интенсивность пиков упруго отраженных электронов. Апробация представленной количественной методики проведена на основе сравнения результатов расчета с результатами численно точного решения уравнения (1) методом дискретных ординат [20]. На основе разработанной количественной методики описания сигнала СПУОЭ определены относительные концентрации протия и дейтерия в углеводородных и бериллиевых образцах соответственно.

Информационная глубина СПУОЭ методики составляет величину средней длины свободного неупругого пробега электронов, которая растет с ростом энергии примерно пропорционально энергии и для энергии электронов порядка кэВ составляет несколько нм. Продемонстрирован метод неразрушающего послойного анализа, основанный на расшифровке широкой области энергетического спектра отраженных электронов – СОЭ метод. Информационная глубина СОЭ метода составляет величину средней длины транспортного пробега электронов, которая пропорциональна квадрату энергии электрона, и для энергий в несколько кэВ в сотни раз превышает среднюю длину свободного неупругого пробега электронов. Продемонстрировано описание энергетических СОЭ спектров как для однородных однокомпонентных мишеней, так и для слоисто-неоднородных многокомпонентных мишеней. Продемонстрирована возможность определения толщин покрытий на основе измерения энергетических спектров СОЭ.

Четвертая глава [А3, А4, А7–А9] посвящена разработке аналитической теоретической модели отражения легких ионов от однородных и слоисто-неоднородных твердых тел. Основой построенной модели является решение граничной задачи для уравнения упругого переноса (2). Показан вывод решения Фоккера-Планка, описывающее распределение отраженных легких ионов, прошедших путь τ в мишени, по потерям энергии. Энергетические спектры отраженных легких ионов получены в приближении непрерывного замедления путем свертки решения (2) с решением Фоккера-Планка:

$$R(\Delta, \mu_0, \mu, \varphi_0, \varphi) = \frac{\mu_0 |\mu|}{\mu_0 + |\mu|} \frac{1}{\bar{\epsilon}} \frac{(1-x_1)(1-\Delta)}{\Delta \cdot \zeta} e^{-\frac{A}{\sqrt{1-\Delta}}} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{2} P_l(\mu_0 \mu + \sqrt{1-\mu_0^2} \sqrt{1-\mu^2} \cos(\varphi_0 - \varphi)) \left(e^{-\frac{(1-x_l)\Delta \cdot \zeta}{(1-x_1)(1-\Delta)^{5/2}}} - e^{-\frac{\Delta \cdot \zeta}{(1-x_1)(1-\Delta)^{5/2}}} \right), \quad (6)$$

где Δ – потери энергии ионов; $\bar{\epsilon}$ – средние потери энергии иона в единице длины пути в мишени; $\zeta = R_0 / l_{tr}$; R_0 – тормозной путь ионов в мишени; l_{tr} – транспортная длина пробега в мишени; множитель $e^{-\frac{A}{\sqrt{1-\Delta}}}$ – учитывает процесс перезарядки протонов; A – подгоночный параметр.

Получены угловые распределения отраженных легких ионов с учетом процесса перезарядки:

$$R(\mu_0, \mu, \varphi_0, \varphi) = \frac{\mu_0 |\mu|}{\mu_0 + |\mu|} e^{-\frac{A}{|\mu|}} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{2} P_l(\mu_0 \mu + \sqrt{1 - \mu_0^2} \sqrt{1 - \mu^2} \cos(\varphi_0 - \varphi)) S_l, \quad (7)$$

где $S_l = \text{Ei}(- (1 - x_l) / (1 - x_l) \zeta) - \ln(1 - x_l)$ при $l > 0$; $S_0 = C + \ln(\zeta / (1 - x_l))$; Ei – интегральная экспонента; C – постоянная Эйлера.

Продемонстрированы решения, описывающие интегральные характеристики отражения легких ионов – коэффициенты отражения энергии и частиц:

$$R_E(\mu_0) = C_0(\mu_0)(1 - \zeta^{-1}) + \sum_{l=1}^{\infty} C_l(\mu_0) \cdot P_l(\mu_0) \cdot \frac{1}{\zeta} \left[\frac{1}{(1 - x_l)} (1 - e^{-\zeta(1-x_l)}) - 1 \right], \quad (8)$$

$$R_N(\mu_0) = \sum_l S_l \cdot C_l(\mu_0) \cdot P_l(\mu_0), \quad (9)$$

где $C_l(\mu_0) = \pi \cdot (2l + 1) \int_0^{-1} [|\mu| / (|\mu| + \mu_0)] \cdot P_l(\mu) d\mu$; $\zeta = R_0 / l_{el}$; l_{el} – средняя длина свободного упругого пробега.

Представлено сравнение результатов расчета энергетических спектров, угловых распределений, коэффициентов отражения энергии и частиц с результатами компьютерного моделирования и экспериментальными данными для различных мишеней, различной энергии зондирующего пучка легких ионов (от сотен эВ до десятков кэВ) и различной геометрии рассеяния.

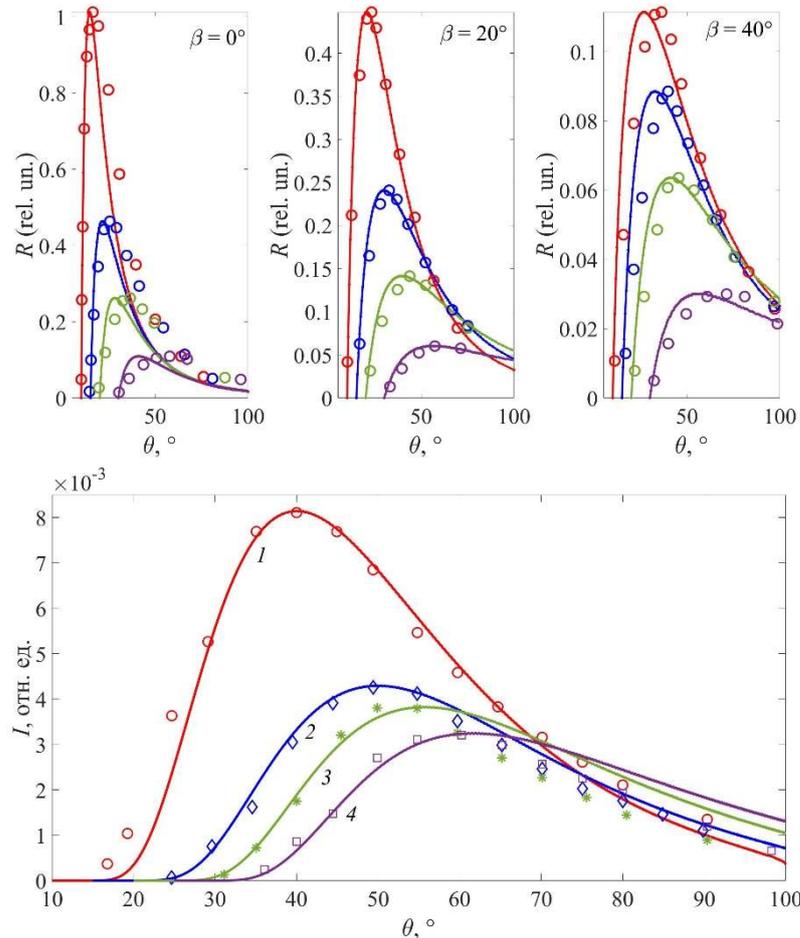


Рис. 2. Верхняя карт.: угловое распределение суммарного по зарядовым фракциям потока протонов, отраженных от Ni. $E_0 = 20$ кэВ. $\beta = \text{tg}(\varphi) \cos(\theta - \alpha)$ – угол отклонения от плоскости падения, где φ – азимутальный угол; θ – полярный угол рассеяния; α – полярный угол скольжения. $\alpha = 10^\circ$ - красная линия; $\alpha = 15^\circ$ - синяя линия; $\alpha = 20^\circ$ - зеленая линия; $\alpha = 30^\circ$ - фиолетовая линия. Символы – эксперимент [21]. Нижняя карт.: угловые распределения протонов, отраженных от Cu. $E_0 = 21.6$ кэВ, угол падения: 80° (1); 75° (2); 70° (3); 65° (4). Символы – эксперимент [22]. Линии – расчет на основе формулы (7).

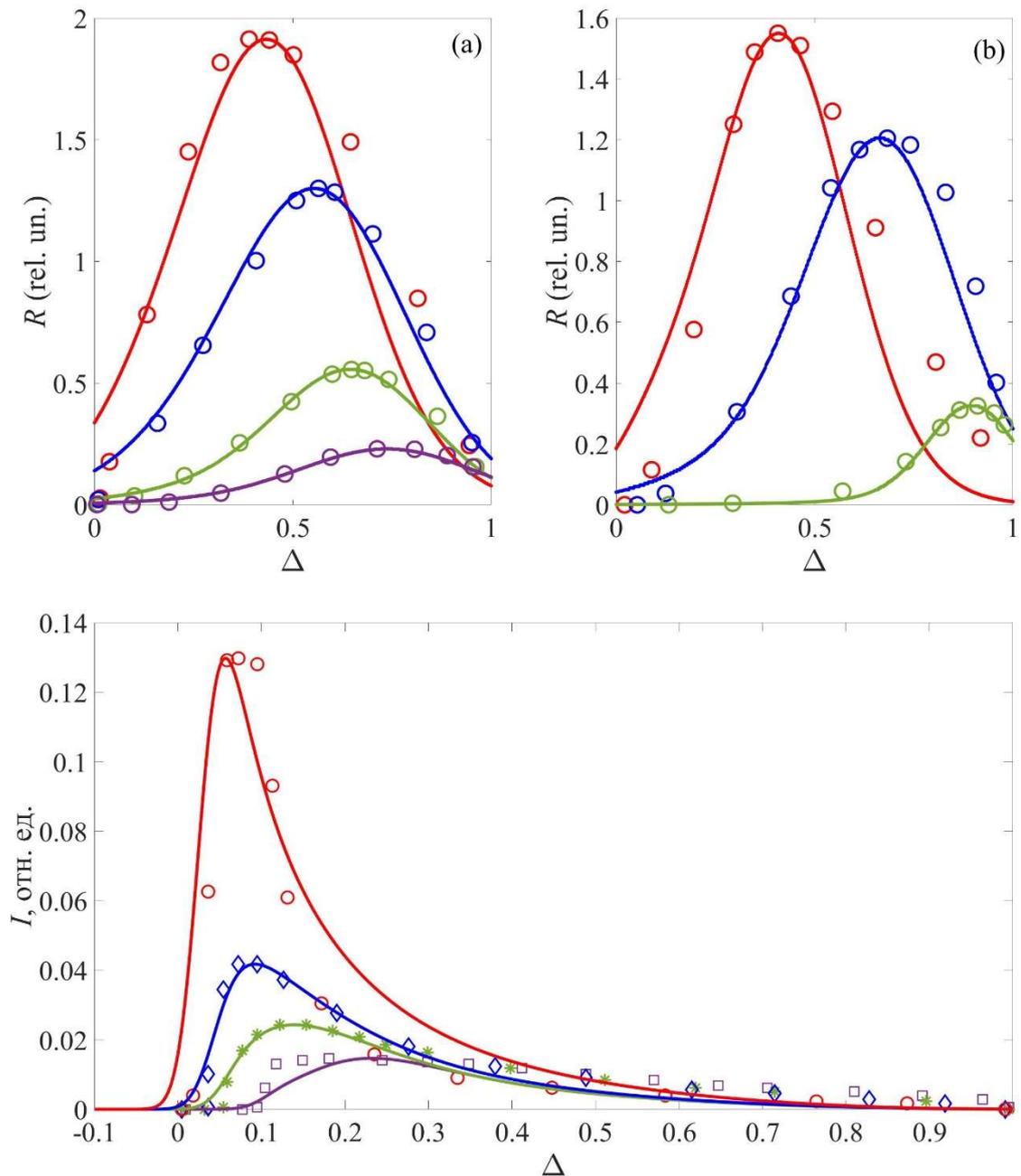


Рис. 3. Верхняя карт.: энергетические спектры протонов, отраженных от графитовой мишени. (а): для различной энергии зондирующих протонов (красная линия – 5 кэВ; синяя линия – 10 кэВ; зеленая линия – 20 кэВ; фиолетовая линия – 30 кэВ); угол падения 85° , угол рассеяния 15° . (б): для различных углов рассеяния (красная линия – 8.5° ; синяя линия – 20° ; зеленая линия – 30°); угол падения 85° ; начальная энергия протонов $E_0 = 15$ кэВ. Линии – расчет на основе формулы (6), кружки – эксперимент [21]. Нижняя карт.: дифференциальные по энергии спектры дейтонов, отраженных от Ni. $E_0 = 300$ эВ. Угол визирования $\theta_0 = 0^\circ$ (фиолетовая линия; квадратики), 45° (зеленая линия; звездочки), 60° (синяя линия; ромбики), 75° (красная линия; кружки). Линии – расчет на основе формулы (6); значки – данные компьютерного моделирования [23]

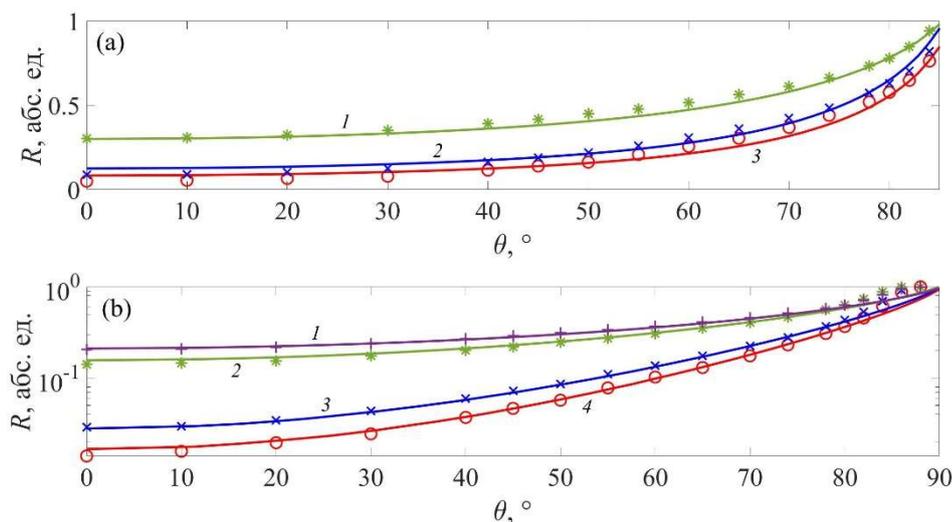


Рис. 4. (а): Коэффициенты отражения частиц R_N как функция угла падения пучка протонов. $E_0 = 1$ кэВ. (1) – Cu; (2) – C; (3) – Be. Линии – расчет на основе формулы (9); символы – моделирование по программе OKSANA. (б): Коэффициенты отражения энергии R_E как функция угла падения пучка протонов. $E_0 = 1$ кэВ. (1) – W; (2) – Cu; (3) – C; (4) – Be. Линии – расчет на основе формулы (8); символы – моделирование по программе OKSANA

Продемонстрированы результаты расчета энергетических спектров протонов, отраженных от слоисто-неоднородных мишеней (методика, развитая в главе 3) на примере энергетических спектров протонов, отраженных от вольфрама, покрытого слоями лития различной толщины. Показана динамика изменения энергетических спектров протонов с ростом толщины слоя лития на поверхности вольфрама. Показана возможность определения толщин покрытий.

В пятой главе [A5, A10–A12] представлена количественная методика описания энергетических спектров рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии (РФЭС) – Photo Electron Spectra analysis (PES analysis). Традиционно в РФЭС анализе используют Peak Shape Analysis (PSA), основанный на анализе пиков фотоэлектронов, вышедших в вакуум без неупругих потерь энергии [14]. Однако, как показано в [15], данный метод не позволяет определять послонные профили. Отмеченная проблема связана с тем, что решается обратная задача, некорректная с математической точки зрения. Для последовательного анализа образцов необходимо наряду с пиками анализировать область потерь энергии, примыкающую к пику. В настоящей работе развита методика, реализующая анализ, основанный на расшифровке широкой области РФЭС спектра.

Построена аналитическая теоретическая модель описания процессов рассеяния фотоэлектронов в твердом теле. Методом инвариантного погружения решена граничная задача с внутренними источниками для фотоэлектронов. Получено аналитическое решение для функции фотоэлектронной эмиссии, описывающее распределение фотоэлектронов по длине пробега:

$$Q(s, \mu) = \mu \frac{\sigma_{x \rightarrow e}}{2} \left[e^{-\frac{\zeta s_{tr}}{4}} - \frac{\beta}{4} e^{-\frac{(1-x_2)}{(1-x_1)} s_{tr}} (3\mu_1^2 - 1) \right], \quad (10)$$

где s_{tr} – пробег фотоэлектронов в мишени, выраженный в единицах транспортной длины пробега; μ – косинус полярного угла между направлением вылета

фотоэлектронов и нормалью к поверхности; μ_1 – косинус полярного угла рассеяния; $\sigma_{x \rightarrow e}$ – сечение фотоионизации; β – параметр асимметрии сечения фотоионизации.

Энергетические спектры фотоэлектронов получены путем сверки решения (10) с решением Ландау:

$$Q(\Delta, \mu) = \mu l_{in} \frac{\sigma_{x \rightarrow e}}{2} \sum_{k=0}^{\infty} x_{in}^k(\Delta) \left[\frac{1}{\left(1 + \frac{\zeta l_{in}}{4 l_{tr}}\right)^{k+1}} - \frac{\beta}{4} \frac{3\mu_1^2 - 1}{\left(1 + \frac{(1-x_2) l_{in}}{1-x_1 l_{tr}}\right)^{k+1}} \right], \quad (11)$$

где l_{in} – средняя длина свободного неупругого пробега электронов.

Получено решение, описывающее угловое распределение фотоэлектронов, вышедших в вакуум, не испытав неупругого рассеяния:

$$Q_0 = \mu l_{in} \frac{\sigma_{x \rightarrow e}}{2} \left[\frac{1}{\left(1 + \frac{\zeta l_{in}}{4 l_{tr}}\right)} - \frac{\beta}{4} \frac{(3\mu_1^2 - 1)}{\left(1 + \frac{1-x_2 l_{in}}{1-x_1 l_{tr}}\right)} \right]. \quad (12)$$

Построенная аналитическая методика апробирована на основе сравнения распределения фотоэлектронов по длине пробега и угловых распределений фотоэлектронов, вышедших в вакуум без неупругих потерь энергии.

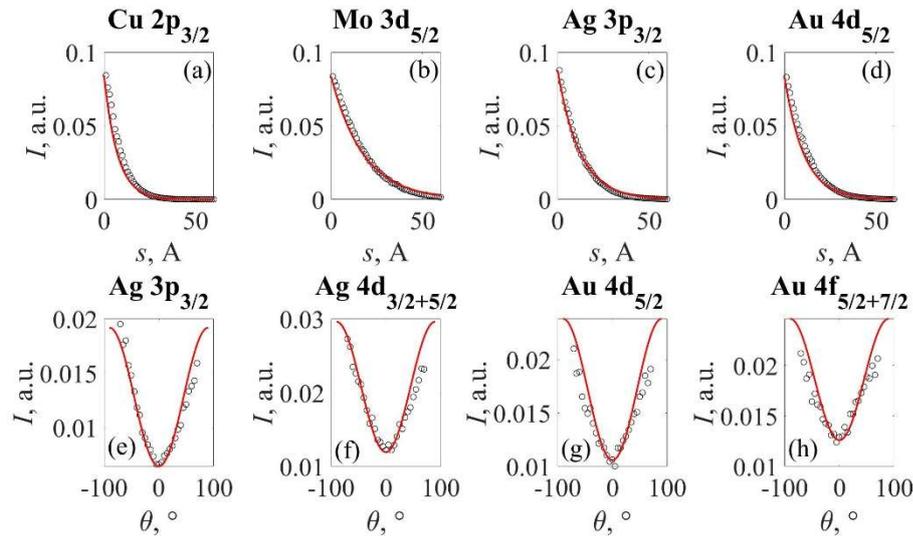


Рис. 5. (а)-(d): распределение фотоэлектронов по длине пробега в геометрии «magic angle».

Кружки – моделирование [16,24]; линии – расчет на основе (10). (е)-(h): угловые распределения фотоэлектронов, вышедших в вакуум без неупругих потерь энергии. Кружки – эксперимент [25]; линии – расчет на основе (12)

Центральным понятием количественной электронной спектроскопии и расчетов на основе (11) является дифференциальное сечение неупругого рассеяния электронов. В работе продемонстрирована методика восстановления дифференциального сечения неупругого рассеяния электронов из экспериментальных РФЭС спектров. Дифференциальное сечение неупругого рассеяния электронов, являясь мнимой частью диэлектрической проницаемости, однозначно определяет аллотропную форму рассматриваемого материала.

На основе построенной аналитической методики описания энергетических РФЭС спектров проведен ряд исследований конструкционных материалов термоядерных установок. Исследовано изменение аллотропной формы вольфрама, подвергнутого воздействию стационарной гелиевой плазмы на установке ПЛМ, приводящее к образованию наноструктур вольфрамовый «пух».

Показано, что аллотропная структура вольфрама и вольфрамового «пуха» одинакова.

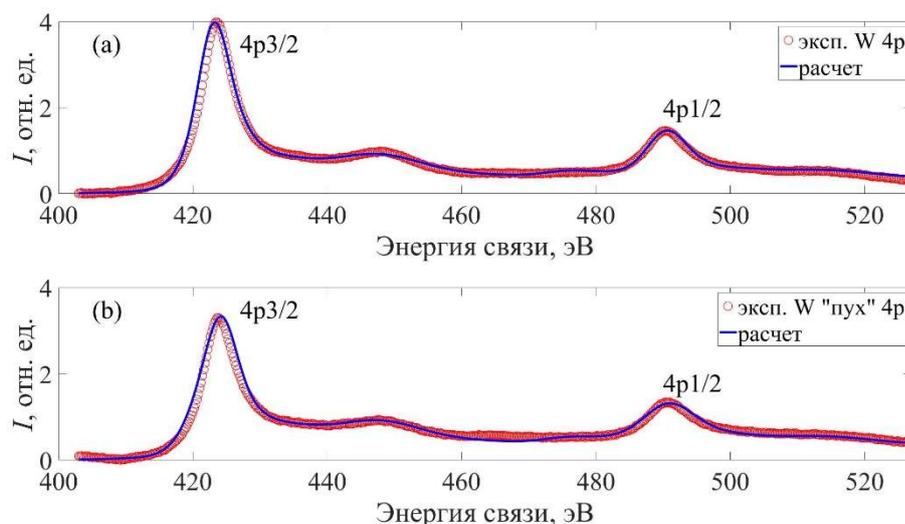


Рис. 6. РФЭС спектры 4p линии вольфрама (а) и вольфрамового «пуха» (b), снятые с высоким разрешением. Кружки – эксперимент; линии – расчет на основе формулы (11)

Проведено исследование высоко ориентированного пиролитического графита (ВОПГ) с угловым разрешением с целью установить зависимость спектра потерь энергии фотоэлектронов от числа графеновых слоев, формирующих экспериментальный РФЭС сигнал. Проанализированы экспериментальные РФЭС спектры для однослойного, двухслойного, пятислойного и десятислойного графена, восстановлены дифференциальные сечения неупругого рассеяния электронов для каждого спектра (рис. 7а). Проведено сравнение данных сечений с сечениями, восстановленными из экспериментальных РФЭС спектров, измеренных с угловым разрешением, для ВОПГ (рис. 7b).

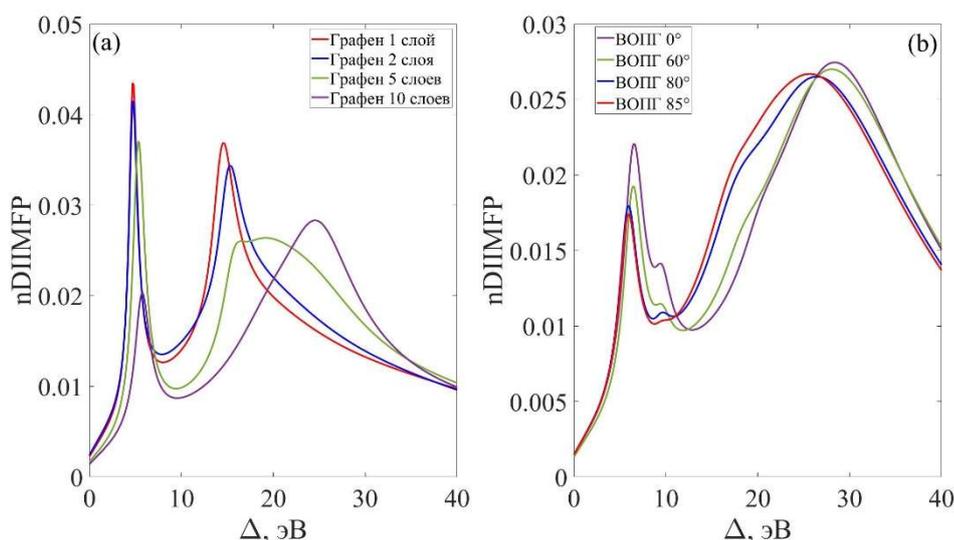


Рис. 7. (а): дифференциальные сечения неупругого рассеяния электронов, восстановленные из экспериментальных данных [26], для однослойного, двухслойного, пятислойного и десятислойного графена. (b): дифференциальные сечения неупругого рассеяния электронов в ВОПГ как функция угла детектирования, отсчитываемого от нормали к графеновым плоскостям

Показано, что спектр плазмонных возбуждений в гетероструктуре определяет весь массив образца, поскольку это коллективные возбуждения. Вклад любого, добавленного в гетероструктуру слоя нельзя назвать определяющим в формировании спектра потерь энергии электронов.

Проведено исследование графитового материала, в течение длительного времени используемого в качестве первой стенки токамака EAST. На основе дифференциального сечения неупругого рассеяния электронов в углеводородных пленках, с высокой точностью описывающих РФЭС спектры алмазоподобных пленок (рис. 8 верх. карт.), полученных методом плазмохимического распыления, описаны РФЭС спектры поверхности графита, обращенной к плазме (рис. 8 нижн. карт.).

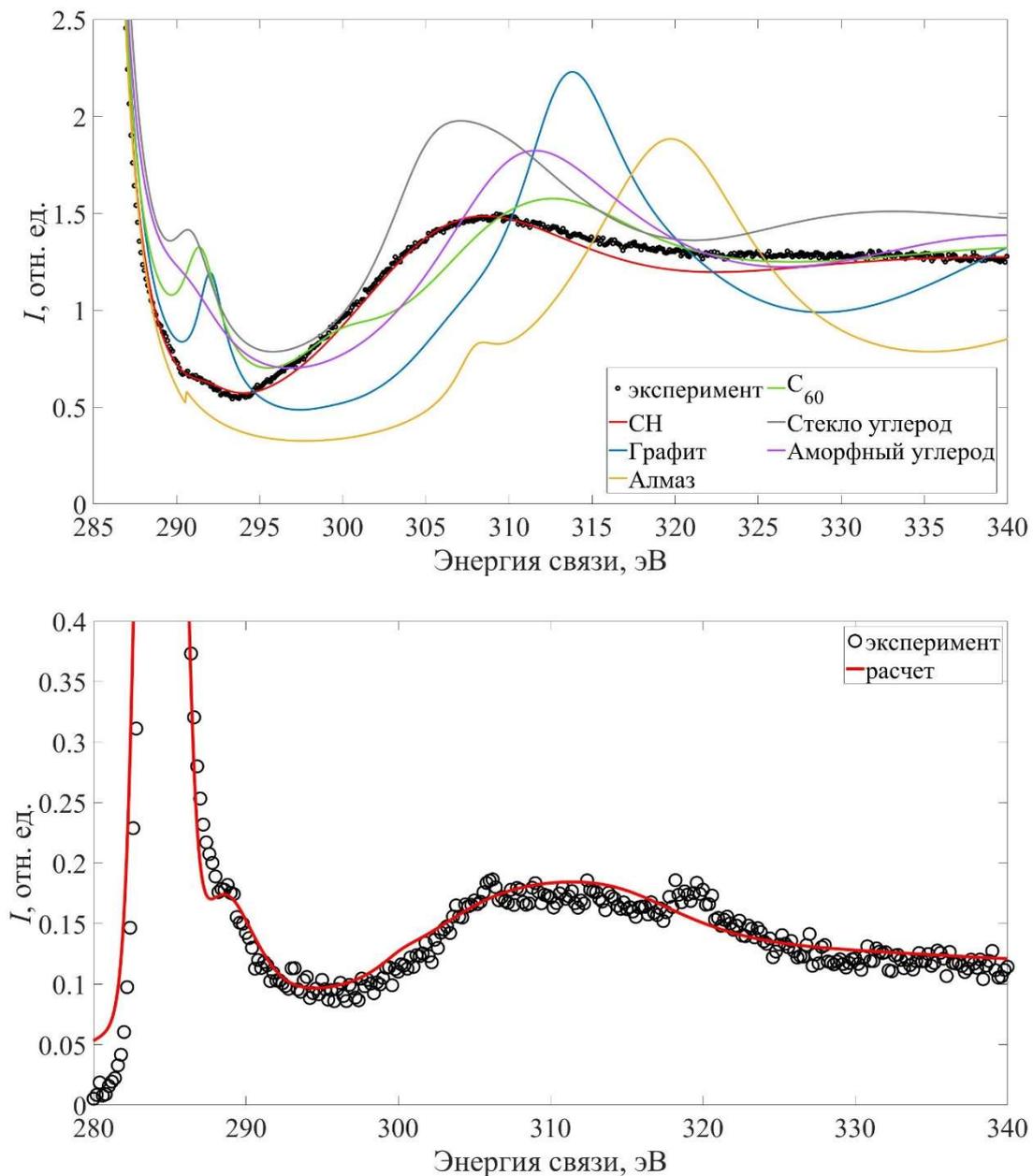


Рис. 8. Верхняя карт.: описание РФЭС спектра алмазоподобных покрытий на основе PES методики с использованием различных аллотропных форм углерода. Совпадение экспериментальных и расчетных спектров – на основе сечения углеводородов. Нижняя карт.: описание РФЭС спектра поверхности графита EAST на основе сечения углеводородов

Показано, что поверхность графита марки АТJ в результате длительной эксплуатации в качестве конструкционного материала первой стенки токамака EAST покрывается аморфными алмазоподобными пленками. Данный факт кардинально меняет представление о поведении графитовых материалов в плазменных условиях термоядерных установок. Исследования, проведенные ранее с графитом марки МПГ-8, подверженным воздействию стационарной гелиевой плазмы на установке ПЛМ, имитирующей условия плазма-стенка, показали, что поверхность графита переходит в структуру пиролитического графита.

Заключение, основные выводы

1. Впервые разработана аналитическая теоретическая модель описания процесса отражения легких ионов от твердых тел, справедливая для любой геометрии рассеяния легких ионов и в широком интервале энергии зондирующего пучка легких ионов от сотен эВ до десятков кэВ. Представленная аналитическая теоретическая модель позволяет с высокой скоростью решать прямые задачи определения энергетических и угловых распределений отраженных легких ионов, коэффициентов отражения частиц и энергии. Созданная аналитическая теоретическая модель определяется двумя безразмерными параметрами, которые однозначно определяют физическую природу исследуемого процесса. Первый параметр – параметр экранирования, равный квадрату отношения волны де Бройля к радиусу Дебая; второй параметр – отношение остаточного пробега частицы (тормозного пути) к длине транспортного пробега. Данные безразмерные параметры позволяют физически обоснованно использовать характеристики рассеяния легких ионов, известные с погрешностью, достигающей сотни процентов; определять границы применимости существующих подходов описания этих процессов. Созданная аналитическая теория доказала необоснованность использования теорий, подобных теории прямолинейных траекторий, двукратного и т.д. кратных рассеяний для описания процесса отражения легких ионов «термоядерных» энергий.

2. Разработанная аналитическая теоретическая модель позволяет описать интегральные и дифференциальные характеристики рассеяния легких ионов в твердом теле в интервале энергии зондирующего пучка легких ионов от сотни эВ до десятков кэВ и для любой геометрии рассеяния. Представленная теоретическая модель позволяет учесть эффекты зависимости сечений упругого и неупругого рассеяния от энергии и перезарядки при отрыве легких ионов от поверхности мишени. Представленные результаты апробации теоретической модели на основе сравнения с данными компьютерного моделирования и экспериментальными данными показали высокое качество описания процесса многократного рассеяния легких ионов в твердом теле на основе созданной в работе аналитической теоретической модели.

3. Создана количественная методика описания сигнала спектроскопии пиков упруго отраженных электронов с учетом вклада процесса многократного рассеяния электронов для многокомпонентных мишеней. Методика апробирована

на основе сравнения с результатами компьютерного моделирования методом Монте-Карло и методом дискретных ординат. Разработанная количественная методика позволяет определять содержание изотопов водорода в материале на глубине порядка средней длины свободного неупругого пробега электронов.

4. Развита количественная методика описания сигнала спектроскопии отраженных электронов для слоисто-неоднородных мишеней, позволяющая осуществлять послойный анализ водорода на глубинах, определяемых длиной транспортного пробега электронов.

5. Развита количественная методика описания энергетических спектров рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии, позволяющая осуществлять расшифровку широкой области потерь энергии фотоэлектронов. В малоугловом приближении получено решение, описывающее распределение фотоэлектронов по длине пробега в мишени. Методом парциальных интенсивностей получено решение, описывающее энергетические спектры фотоэлектронов. Созданная методика позволяет мгновенно решать прямую задачу определения энергетического спектра фотоэлектронов, что является эффективным способом решения обратной задачи восстановления дифференциального сечения неупругого рассеяния электронов, определяющее аллотропную форму материала, на основе процедуры подбора экспериментальных и расчетных спектров.

6. Созданная количественная методика расшифровки энергетических спектров РФЭС позволила: исследовать алмазоподобные покрытия, полученные методом плазмохимического осаждения, однозначно определить электронную структуру поверхности, представляющую собой углеводородные покрытия; исследовать изменение электронной структуры графита марки МПГ-8, подверженного плазменной обработке на установке ПЛМ в НИУ «МЭИ», однозначно определить переход электронной структуры в структуру пиролитического графита; определить особенности в дифференциальном сечении неупругого рассеяния электронов в высоко ориентированном пиролитическом графите, исследовать законы потерь энергии электронов в ВОПГ в зависимости от числа слоев, формирующих РФЭС сигнал; исследовать изменение электронной структуры вольфрамовой фольги, подверженной плазменному воздействию на установке ПЛМ в НИУ «МЭИ», приводящей к образованию вольфрамового «пуха», однозначно установить, что электронная структура вольфрама и вольфрамового пуха одинакова; исследовать образцы графита марки АТJ, подверженные плазменному воздействию на токамаке EAST, однозначно определить, что поверхность покрыта алмазоподобными структурами.

Список публикаций автора

Результаты диссертации отражены в следующих публикациях в научных журналах, рекомендованных для защиты в диссертационных советах МГУ по специальности и отрасли наук:

A1 В.П. Афанасьев, Л.Г. Лобанова. Влияние процессов многократного упругого рассеяния в многокомпонентных мишенях на интенсивность пиков упруго отраженных электронов // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и

нейтронные исследования. 2022. № 6. С. 76 – 81. EDN: KQBHAD. Импа́кт-фактор 0.863 (РИНЦ). **Авт. вклад 0.4 из 0.7 п.л.**

V.P. Afanas'ev, L.G. Lobanova. Influence of Multiple-Elastic-Scattering Processes in Multicomponent Targets on the Intensity of the Peaks of Elastically Reflected Electrons // Journal of Surface Investigation: X-Ray, Synchrotron and Neutron Techniques. 2022. V. 16. № 3. P. 384 – 389. EDN: HZQJPL. Импа́кт-фактор 0.4 (JIF). **Авт. вклад 0.4 из 0.7 п.л.**

A2 В.П. Афанасьев, Л.Г. Лобанова. Влияние многократного рассеяния на точность определения концентрации изотопов водорода при использовании спектроскопии пиков упруго отраженных электронов // Известия РАН. Серия физическая. 2022. Т. 86. № 5. С. 621 – 626. EDN: IVMXWQ. Импа́кт-фактор 0.966 (РИНЦ). **Авт. вклад 0.4 из 0.7 п.л.**

V.P. Afanas'ev, L.G. Lobanova. Effect of Multiple Scattering on the Accuracy of Determining Concentrations of Hydrogen Isotopes via Elastic Peak Electron Spectroscopy // Bulletin of the Russian Academy of Science: Physics. 2022. V. 86. № 5. С. 516 – 520. EDN: NUWUUS. Импа́кт-фактор 0.253 (SJR). **Авт. вклад 0.4 из 0.7 п.л.**

A3 В.П. Афанасьев, Л.Г. Лобанова. Применение методов, используемых при интерпретации спектров электронной спектроскопии, к расшифровке сигналов ионной спектроскопии // Микроэлектроника. 2022. Т. 51. № 4. С. 255 – 264. EDN: SQDPQI. Импа́кт-фактор 0.824 (РИНЦ). **Авт. вклад 0.6 из 1.2 п.л.**

V.P. Afanas'ev, L.G. Lobanova. Application of the Methods Used to Interpret the Electron Spectroscopy Spectra to Interpret Ion Spectroscopy Signals // Russian Microelectronics. 2022. V. 51. № 4. P. 210 – 219. EDN: NFPDGX. Импа́кт-фактор 0.194 (SJR). **Авт. вклад 0.6 из 1.2 п.л.**

A4 В.П. Афанасьев, Л.Г. Лобанова, В.И. Шульга. Отражение легких ионов от поверхности тел: аналитическая модель и компьютерное моделирование // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. 2023. № 1. С. 86 – 91. EDN: BKNAPH. Импа́кт-фактор 0.863 (РИНЦ). **Авт. вклад 0.4 из 0.7 п.л.**

V.P. Afanas'ev, L.G. Lobanova, V.I. Shulga. Reflection of Light Ions from a Solid Surface: Analytical Model and Computer Simulation // Journal of Surface Investigation: X-Ray, Synchrotron and Neutron Techniques. 2023. V. 17. № 1. P. 78 – 83. EDN: GCRFYG. Импа́кт-фактор 0.4 (JIF). **Авт. вклад 0.4 из 0.7 п.л.**

A5 V.P. Afanas'ev, G.S. Bocharov, A.V. Elets'kii, L.G. Lobanova, K.I. Maslakov, S.V. Savilov. Comparative Investigation of XPS Spectra of Oxidated Carbon Nanotubes and Graphene // Biophysica. 2023. V. 3. № 2. P. 307 – 317. EDN: XDPOMY. Импа́кт-фактор 1.4 (JIF). **Авт. вклад 0.4 из 1.3 п.л.**

A6 В.П. Афанасьев, Л.Г. Лобанова. Определение послойных профилей изотопов водорода в углероде и бериллии на основе методик электронной спектроскопии // Физика плазмы. 2023. Т. 49. № 10. С. 1034 – 1039. EDN: EQZLPW. Импа́кт-фактор 0.972 (РИНЦ). **Авт. вклад 0.5 из 0.7 п.л.**

V.P. Afanas'ev, L.G. Lobanova. Determination of Layer-By-Layer Profiles of Hydrogen Isotopes in Carbon and Beryllium Based on Electron Spectroscopy Methods

// Plasma Physics Reports. 2023. V. 49. № 10. P. 1237 – 1241. EDN: WGMQMB. Импакт-фактор 1.1 (JIF). **Авт. вклад 0.5 из 0.7 п.л.**

A7 В.П. Афанасьев, Л.Г. Лобанова. Аналитическая теория отражения изотопов водорода термоядерных энергий от конструкционных материалов // Физика плазмы. 2024. Т. 50. № 2. С. 231 – 238. EDN: SBWFMG. Импакт-фактор 0.972 (РИНЦ). **Авт. вклад 0.6 из 0.9 п.л.**

V.P. Afanas'ev, L.G. Lobanova. Analytical Theory of Reflection of Hydrogen Isotopes of Thermonuclear Energies from Construction Materials // Plasma Physics Reports. 2024. V. 50. № 2. P. 247 – 254. EDN: ААКННС. Импакт-фактор 1.1 (JIF). **Авт. вклад 0.6 из 0.9 п.л.**

A8 В.П. Афанасьев, Л.Г. Лобанова, В.И. Шульга. Коэффициенты отражения легких ионов от поверхности твердого тела // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. 2024. № 7. С. 97 – 102. EDN: EUOGQT. Импакт-фактор 0.863 (РИНЦ). **Авт. вклад 0.4 из 0.7 п.л.**

V.P. Afanas'ev, L.G. Lobanova, V.I. Shulga. Coefficients of Light-Ion Reflection from a Solid Surface // Journal of Surface Investigation: X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques. 2024. V. 18. № 4. P. 846 – 850. EDN: UIYVTE. Импакт-фактор 0.4 (JIF). **Авт. вклад 0.4 из 0.7 п.л.**

A9 V.P. Afanas'ev, L.G. Lobanova. Analytical model of light ions reflection from solids // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms. 2025. V. 560. P. 165610. EDN: BSKUNO. Импакт-фактор 1.205 (JIF). **Авт. вклад 0.7 из 0.9 п.л.**

A10 L.G. Lobanova, S. Wang, H. Lian, X. Cui, J. Chen, R. Yan, L. Zhang, V.P. Afanas'ev, H. Liu. The plasma-chemical mechanism of surface destruction of the diagnostic system components inside EAST vacuum vessel // Nuclear Materials and Energy. 2025. V. 43. P. 101938. EDN: RSZCHW. Импакт-фактор 2.7 (JIF). **Авт. вклад 0.6 из 0.8 п.л.**

A11 L.G. Lobanova, V.P. Afanas'ev, L. Zhang, A.V. Dedov, M.A. Semenov-Shefov, S. Wang, J. Chen, S.D. Fedorovich, H. Liu. Investigation of Changes in the Allotropic Structure of Graphite Surface under Plasma Exposure in the EAST Tokamak and PLM // Technical Physics. 2025. V. 70. № 6. P. 180 – 187. EDN: ZRSUYI. Импакт-фактор 0.7 (JIF). **Авт. вклад 0.6 из 0.9 п.л.**

A12 В.П. Афанасьев, Л.Г. Лобанова, А.В. Елецкий, К.И. Маслаков, М.А. Семенов-Шефов, Г.С. Бочаров. Анализ спектров рентгеновской фотоэлектронной эмиссии высокоориентированного пиролитического графита, измеренных с угловым разрешением // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. 2025. № 4. P. 63 – 69. EDN: FCEQNO. Импакт-фактор 0.863 (РИНЦ). **Авт. вклад 0.4 из 0.8 п.л.**

V.P. Afanas'ev, L.G. Lobanova, A.V. Elets'kii, K.I. Maslakov, M.A. Semenov-Shefov, G.S. Bocharov. Analysis of the Angle-Resolved X-ray Photoelectron Emission Spectra of Highly Oriented Pyrolytic Graphite // Journal of Surface Investigation: X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques. 2025. V. 19. № 2. P. 450 – 454. EDN: HMCQNU. Импакт-фактор 0.4 (JIF). **Авт. вклад 0.4 из 0.8 п.л.**

Список цитируемой литературы

1. Машкова Е.С., Молчанов В.А. Применение рассеяния ионов для анализа твердых тел. М.: Энергоатомиздат, 1995. – 176 с.
2. Модифицирование и легирование поверхности лазерными, ионными и электронными пучками/под. Ред. Д.М. Поута, Г. Фоти, Д.С. Джекобсона. М.: Машиностроение, 1987. – 482 с.
3. Курнаев В.А., Машкова Е.С., Молчанов В.С. Отражение легких ионов от поверхности твердого тела. М.: Энергоатомиздат, 1985. – 192 с.
4. Парилис Э.С., Тураев Н.Ю., Умаров Ф.Ф., Нижная С.Л. Теория рассеяния атомов средних энергий поверхностью твердого тела. Ташкент., Фан, 1987. –212 с.
5. Калашников Н.П., Ремизович В.С., Рязанов М.И. Столкновения быстрых заряженных частиц в твердых телах. М.: Атомиздат, 1980. – 272 с.
6. Bethe H. A. // Ann. Physik, 1940, V. 5, P. 325
7. Экштайн В. Компьютерное моделирование взаимодействия частиц с поверхностью твердого тела / В. Экштайн; Пер. с англ. М. Г. Степановой; Под ред. Е. С. Машковой. М.: Мир, 1995. – 319 с.
8. NIST Electron Elastic-Scattering Cross-Section Database - Version 3.2, National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, MD, 2010.
9. Lanford W.A. Analysis of hydrogen by nuclear reaction and energy recoil detection // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res., Sect. B, 1992, V. 66, No. 1-2, P. 65 – 82. [https://doi.org/10.1016/0168-583X\(92\)96142-L](https://doi.org/10.1016/0168-583X(92)96142-L)
10. Kimura K. et al., Hydrogen depth-profiling in chemical-vapor-deposited diamond films by high-resolution elastic recoil detection // Appl. Phys. Lett., 2001, V. 78, P. 1679 – 1681. <http://dx.doi.org/10.1063/1.1356452>
11. Vos M. Detection of hydrogen by electron Rutherford backscattering // Ultramicroscopy, 2002, V. 92, No. 3-4, P. 143 – 149. [https://doi.org/10.1016/S0304-3991\(02\)00127-4](https://doi.org/10.1016/S0304-3991(02)00127-4)
12. Vos M., Marmitt G.G., Grande P.L. A comparison of ERBS spectra of compounds with Monte Carlo simulations // Surf. Interface Anal., 2016, V. 48, No. 7, P. 415 – 421. <https://doi.org/10.1002/sia.5948>
13. Afanas`ev V.P., Naujoks D. Backscattering of fast electrons // Phys. Stat. Sol., 1990, V. 164, No. 1, P. 133 – 140. <https://doi.org/10.1002/pssb.2221640113>
14. Hoffman, S. Auger and X-ray Photoelectron Spectroscopy in Material Science; Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, Germany, 2013. – 528 p.
15. Tougaard S. Surface nanostructure determination by x - ray photoemission spectroscopy peak shape analysis // J. Vac. Sci. Technol. A, 1996, V. 14, No. 3, P. 1415 – 1423. <https://doi.org/10.1116/1.579963>
16. Werner W.S.M. Electron transport in solids for quantitative surface analysis // Surf. Interface Anal., 2001, V. 31, No. 3, P. 141 – 176. <https://doi.org/10.1002/sia.973>
17. Чандрасекар С. Перенос лучистой энергии. М.: ИЛ, 1953. – 462 с.
18. Ландау, Л. Д. Собрание трудов : науч. изд. Т. 1 / Л. Д. Ландау. – Москва : Наука, 1969. – 510 с.

19. Afanas'ev, V.P., Efremenko D.S., Kaplya P.S. Analytical and numerical methods for computing electron partial intensities in the case of multilayer systems // J. Electron. Spectrosc. Relat. Phenom., 2016, V. 210, P. 16 – 29. <https://doi.org/10.1016/j.elspec.2016.04.006>
20. Afanas'ev V.P., Efremenko D.S., Lubenchenko A.V. On the application of the invariant embedding method and the radiative transfer equation codes for surface state analysis. In: Kokhanovsky, A. (eds) Light Scattering Reviews 8. Springer Praxis Books. Springer, Berlin, Heidelberg, 2013. https://doi.org/10.1007/978-3-642-32106-1_8
21. Ding Z.-J., Nagatomi T., Shimizu R., Goto K. Monte Carlo simulation of background in AES: a comparison with experiment // Surf. Sci., 1995, V. 336, No. 3, P. 397 – 403. [https://doi.org/10.1016/0039-6028\(95\)00537-4](https://doi.org/10.1016/0039-6028(95)00537-4)
22. Курнаев В.А., Тельковский В.Г. Экспериментальные данные по обратному рассеянию заряженных частиц // Тексты лекций. – М.: Изд. МИФИ, 1982. – 44 с.
23. Morita K., Akimune H., Suita T. Scattering of Low Energy Hydrogen Ions (H_1^+ , H_2^+ and H_3^+) and Atoms (H_1^0) from Evaporated Metallic Films // Jpn. J. Appl. Phys., 1968, V. 7, No. 8, P. 916 – 926. <https://doi.org/10.1143/JJAP.7.916>
24. Werner W.S.M. Simulation of electron spectra for surface analysis using the partial-intensity approach (PIA) // Surf. Interface Anal., 2005, V. 37, No. 11, P. 846 – 860. <https://doi.org/10.1002/sia.2103>
25. Hucek S., Tilinin I.S., Zemek J. Angular distribution of photoelectrons emitted from solids // J. Electron. Spectrosc. Relat. Phenom., 1997, V. 85, No. 3, P. 263 – 268. [https://doi.org/10.1016/S0368-2048\(97\)00075-3](https://doi.org/10.1016/S0368-2048(97)00075-3)
26. Eberlein T. et al., Plasmon spectroscopy of free-standing graphene films // Phys. Rev. B., 2008, V. 77, No. 23, P. 233406. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.77.233406>