

НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ «МЭИ»

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

Диссертация на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Научный руководитель:
доктор физико-математических наук, доцент
Афанасьев Виктор Петрович

Москва — 2026

Оглавление

Введение	6
Глава 1. Развитие методов интерпретации сигналов электронной и ионной спектроскопии	21
1.1 Теоретические модели отражения легких ионов и электронов от твердых тел	21
1.1.1 Модель одного отклонения.....	22
1.1.2 Модель двукратного отклонения	23
1.1.3 Теории многократного рассеяния	24
1.1.3.1 Диффузионное приближение	24
1.1.3.2 Теория О. Б. Фирсова	25
1.1.3.3 Модель Бете.....	26
1.1.3.4 Модель, основанная на процедуре линеаризации уравнений инвариантного погружения	27
1.1.3.5 Модель С. Э. Бородянского	28
1.2 Методы компьютерного моделирования	29
1.3 Методы анализа водорода и его изотопов в поверхности твердых тел	30
1.3.1 Вторичная ионная масс-спектрометрия	30
1.3.2 Термодесорбционная спектроскопия.....	32
1.3.3 Метод ядерных реакций	33
1.3.4 Спектроскопия атомов отдачи.....	34
1.3.5 Методы электронной спектроскопии.....	35
1.3.5.1 Спектроскопия характеристических потерь энергии электронов ..	35
1.3.5.2 Спектроскопия отраженных электронов.....	37
1.3.5.3 Спектроскопия пиков упруго отраженных электронов.....	38
1.4 Рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия.....	41
Глава 2. Аналитическое решение задачи отражения электронов и легких ионов в твердых телах	45

2.1 Уравнения переноса электронов и легких ионов	45
2.2 Решение граничной задачи для уравнения упругого переноса. Определение функции распределения электронов и легких ионов по длине пробега	48
2.3 Основные результаты и выводы второй главы.....	59
Глава 3. Количественная методика описания характеристических потерь энергии электронов в твердых телах	61
3.1 Решение граничной задачи для уравнения неупругого переноса электронов. Решение Ландау.....	61
3.2 Энергетические спектры отраженных электронов.....	62
3.3 Модель отражения от слоисто-неоднородных мишеней.....	64
3.4 Угловые распределения отраженных электронов.....	66
3.5 Аналитическая методика описания сигнала спектроскопии пиков упруго отраженных электронов	68
3.5.1 Апробация развитого метода расчета угловых распределений упруго отраженных электронов на основе сравнения с результатами моделирования методом дискретных ординат.....	68
3.5.2 Учет влияния процесса многократного упругого рассеяния	73
3.6 Определение содержания изотопов водорода в углеводородных и бериллиевых образцах.....	78
3.7 Спектроскопия отраженных электронов.....	83
3.8 Основные результаты и выводы третьей главы	90
Глава 4. Аналитическое описание процессов взаимодействия потоков легких ионов с конструкционными материалами	91
4.1 Решение граничной задачи для уравнения неупругого переноса легких ионов. Решение Фоккера-Планка.....	93
4.2 Энергетические спектры отраженных легких ионов	96
4.3 Угловые распределения отраженных легких ионов	99
4.4 Интегральные характеристики отражения легких ионов.....	100

4.5 Результаты расчета интегральных и дифференциальных характеристик рассеяния.....	100
4.6 Основные результаты и выводы четвертой главы	119
Глава 5. Количественная методика расшифровки сигнала рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии.....	122
5.1 Традиционный РФЭС анализ - Peak Shape Analysis	122
5.2 Построение методики PES анализа. Решение граничной задачи с внутренними источниками	128
5.3 Исследование материалов на основе PES метода расшифровки сигналов РФЭС	134
5.3.1 Исследование вольфрама, подвергнутого плазменной обработке на установке ПЛМ	134
5.3.1.1 Эксперимент на установке ПЛМ.....	135
5.3.1.2 PES анализ экспериментальных данных	137
5.3.2 Исследование пиролитического графита и графена	141
5.3.2.1. Эксперимент.....	143
5.3.2.2. PES анализ экспериментальных данных	145
5.3.2.3. Выводы по пункту 5.3.2	147
5.3.3 Исследование графита, используемого в качестве первой стенки токамака EAST	149
5.3.3.1 Оптическая и электронная микроскопия. РФЭС Peak Shape Analysis	150
5.3.3.2 РФЭС Photo Electron Spectra analysis.....	154
5.3.3.3 Физическая модель процесса образования алмазоподобных покрытий в токамаке EAST	158
5.3.3.4 Исследование графита марки МПГ-8 на ПЛМ	160
5.3.3.5 Выводы по пункту 5.3.3	162
5.4 Основные результаты и выводы пятой главы.....	164
Заключение.....	166

Список публикаций автора	169
СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ	173

Введение

Актуальность темы. 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 решения 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 наноэлектроники 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 «третиевая 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 послойных профилей изотопов водорода и гелия в конструкционных материалах на глубинах, не превышающих среднюю длину свободного неупругого пробега электронов. Методы расшифровки энергетических спектров СПУОЭ, базирующиеся на численном моделировании процессов отражения электронов, отработаны только для однокомпонентных материалов [12], что определяет

необходимость обобщения этих методов для анализа многокомпонентных образцов. Для определения послойных 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 послойного анализа с помощью XPS метода невозможно, т.к., как показано в [15], XPS подход сталкивается с проблемой неадекватного решения некорректной математической задачи. Для осуществления послойного, 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. 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 послонных 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) – Photo Electron 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 (компонентного и химического состава, аллотропной формы, послойного содержания 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 микрометров, 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.

Для апробации аналитических результатов использовалось также сравнение с данными компьютерного моделирования (программы TRIM, SRIM, SCATTER, OKSANA, SPIM-L).

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

Глава 1. Развитие методов интерпретации сигналов электронной и ионной спектроскопии

1.1 Теоретические модели отражения легких ионов и электронов от твердых тел

Решение задачи отражения легких ионов и электронов от твердых тел, построенное в данной работе, получено в рамках классической аналитической теории переноса частиц.

Теория переноса возникла при попытке описать явление поворота «тела яркости» [17]. Описание этого явления профессором Петербургского университета Орестом Даниловичем Хвольсоном привело к появлению уравнения переноса излучения [17]. В 1890 г. им была рассмотрена задача о рассеянии света в молочных стеклах, впервые получено интегральное уравнение и исследованы асимптотические случаи [17]. Частный вариант уравнения Хвольсона в 1905 г. был получен и исследован Э. Милном [18].

Первое решение уравнения переноса излучения было найдено Шустером и Шварцшильдом в двух потоковом приближении [18]. Обобщением двух потокового приближения стал метод квадратур Гаусса [18], реализующий много потоковое приближение. Оригинальным решением граничной задачи для уравнения переноса излучения стал метод инвариантного погружения В. А. Амбарцумяна [19].

Независимо от теории переноса излучения развивалась теория переноса частиц [20–23]. Подробный обзор становления теории отражения быстрых ионов, для которых выполняется условие $R_0 \ll l_{tr}$ (R_0 – остаточный пробег частиц в мишени или тормозной путь, l_{tr} – транспортная длина пробега частиц в мишени), представлен в монографии, посвященной спектроскопии Резерфордского обратного рассеяния [24]. Аналитический подход, с хорошей точностью описывающий энергетические спектры отраженных быстрых ионов, именуется приближением одного отклонения.

В 1964 г. метод инвариантного погружения Амбарцумяна был использован для решения задач отражения электронов [25]. Решений полученного уравнения, удовлетворительно описывающих экспериментальные данные, получено не было.

В 1987 г. В. П. Афанасьев доказал возможность перехода от нелинейного уравнения Амбарцумяна к линейному уравнению в силу чрезвычайной малости нелинейного слагаемого, что следовало из «сильной вытянутости» индикатрисы упругого рассеяния [26]. Сделав аналитическое продолжение интегральных слагаемых, Афанасьев получил решение [27], справедливое в случае $R_0/l_{tr} < 1$, описывающее процессы рассеяния ионов с энергией в сотни кэВ и электронов с энергией в несколько МэВ, но дающие большую погрешность при $R_0 \sim l_{tr}$.

Целый ряд качественных методов таких как метод Бете [6], построенный на его основе метод И. С. Тилинина [28], метод Фирсова [29,30] позволяют получить разумную качественную информацию о процессах отражения атомных частиц, но при определенных условиях. Исчерпывающий обзор этих методов, используемых для описания процессов отражения легких ионов, содержится в монографиях Е. С. Машковой и В. С. Молчанова [1,3,31].

1.1.1 Модель одного отклонения

Модель одного отклонения – самая простая теоретическая модель, используемая для описания отражения легких ионов от твердого тела, предложена Рубином и развита в работах [31,32]. В рамках данной модели предполагается, что переход нисходящего движения частиц в восходящее происходит в результате однократного сильного соударения частиц с рассеянием на большой угол θ , причем до и после рассеяния на большой угол частицы движутся по прямолинейным траекториям, непрерывно теряя энергию.

Выражение, определяющее число частиц, рассеянных на угол θ в пределах телесного угла $d\Omega$ в слое dl , расположенном на расстоянии l_1 от поверхности мишени, и вылетающих из мишени с энергией E , выглядит следующим образом:

$$\frac{\partial^2 N}{\partial E \partial \Omega} dE d\Omega = W(E_0, E, \theta) dE d\Omega = n_0 N_0^* P(E_0, l_1) \sigma(E', \theta) P(E', l_2) dl d\Omega = \quad (1.1)$$

$$n_0 N_0^* P(E_0, l_1) \sigma(E', \theta) P(E', l_2) [dE' / \langle dE' / dl \rangle] d\Omega,$$

где n_0 – плотность атомов мишени; N_0^* – плотность потока падающих частиц; $P(E_0, l_1)$ и $P(E', l_2)$ – вероятность прохождения пути l_1 и l_2 без упругого рассеяния соответственно; $\sigma(E', \theta)$ – сечение упругого рассеяния частиц.

Выражение (1.1) позволяет определить энергетическое распределение частиц $W(E_0, E, \theta)$, рассеянных на заданный угол θ , при условии наличия данных по сечению упругого рассеяния частиц $\sigma(E', \theta)$ и закону торможения частиц. Для случая нормального падения легких ионов на тяжелые мишени ($M_1 \ll M_2$), при выполнении условия $P(E_0, l_1) = P(E, l_2)$, в случае, когда средние удельные потери энергии частиц описываются законом – $\langle dE/dx \rangle = n_0 K E^{1/2}$, энергетические спектры отраженных легких ионов описываются следующим образом:

$$W(E_0, E, \theta) = -\sigma(E', \theta) / K E^{1/2} (1 - \sec \theta), \quad (1.2)$$

где K – параметр электронного торможения.

Модель одного отклонения применима в задачах описания отражения легких ионов высоких энергий, т.к. с уменьшением энергии частиц траектория их движения отклоняется от прямолинейной. Данный факт подтверждается экспериментальными данными, которые демонстрируют, что при уменьшении энергии частиц энергетическое распределение приобретает куполообразную форму, в то время как в модели одного отклонения наблюдается монотонный рост числа отраженных частиц.

1.1.2 Модель двукратного отклонения

В модели двукратного отклонения переход нисходящего движения частиц в восходящее рассматривается как результат двух сильных столкновений, при этом вероятность рассеяния на угол θ определяется как произведение

вероятностей двух последовательных актов рассеяния на углы θ_1 и θ_2 ($\theta = \theta_1 + \theta_2$).

Аппроксимационная формула, описывающая энергетическое распределение отраженных частиц в рамках данной модели, выглядит следующим образом:

$$\frac{\partial^2 N}{dE d\Omega} = \frac{\exp\left\{-d[(E/E_0)^{-1/2}-1][\sin(\theta/8)^{-1}-1][1-(E/E_0)^{1/2}]\right\}}{(E/E_0)^{1/2}[(E/E_0)^{1/2} \sin(\theta-\alpha)+\sin \alpha]^3}, \quad (1.3)$$

где $d = 0.227 \left(Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3} \right) \pi \zeta_e^{-1} (E_B/E_0)^{1/2}$; $\zeta_e \approx Z_1^{1/6}$; E_B – энергия Бора.

Выражение (1.3) удовлетворительно описывает изменение положений максимумов куполообразных распределений отраженных частиц в зависимости от угла рассеяния и начальной энергии частиц. Данная модель позволила определить условия возникновения в энергетических спектрах отраженных частиц поверхностного пика [33]. Например, при рассеянии ионов гелия от никелевой мишени на угол 135° формула (1.3) дает значение энергии $E = 5.8$ кэВ, ниже которой в энергетических распределениях отраженных частиц появляется поверхностный пик, что согласуется с экспериментальными данными [34].

1.1.3 Теории многократного рассеяния

Теории многократного рассеяния строятся на основе решения кинетического уравнения Больцмана, которое, при допущении о неподвижности системы атомов мишени, переходит в уравнение переноса.

1.1.3.1 Диффузионное приближение

В данной теоретической модели считается, что основной вклад в средний квадрат угла рассеяния частиц на единице пути дает рассеяние на малые углы. Рассматривается уравнение переноса:

$$\mu \frac{\partial N(z, \vec{n})}{\partial z} = -n \sigma_{el} N(z, \vec{n}) + n \int_0^{2\pi} \int_{-1}^1 \omega_{el}(\vec{n}', \vec{n}) N(z, \vec{n}') d\theta' d\varphi', \quad (1.4)$$

где $N(z, \vec{n})$ – плотность потока частиц, двигающихся в направлении \vec{n} на глубине z ; n – концентрация атомов мишени; $\omega_{el}(\vec{n}', \vec{n})$ – дифференциальное сечение упругого рассеяния частиц, имеющее резкий максимум при $\vec{n}' = \vec{n}$; σ_{el} – полное сечение упругого рассеяния частиц; θ – полярный угол; $\mu = \cos \theta$; φ – азимутальный угол.

В подынтегральном слагаемом уравнения (1.4) вследствие того, что вероятность рассеяния частиц на малые углы значительно превышает вероятность рассеяния частиц на большие углы, функция $N(z, \vec{n}')$ раскладывается в ряд Тейлора вблизи $\mu' = \mu$. Ограничиваются тремя слагаемыми в разложении в ряд Тейлора, в результате чего происходит переход от интегро-дифференциального уравнения (1.4) (для которого не доказана теорема существования и единственности) к уравнению в частных производных типа уравнения диффузии:

$$\mu \frac{\partial N(z, \vec{n})}{\partial z} = - \frac{n \sigma_{tr}}{2} \nabla_{\theta, \varphi} N(z, \vec{n}), \quad (1.5)$$

где $\nabla_{\theta, \varphi}$ – угловая часть оператора Лапласа; σ_{tr} – транспортное сечение.

Диффузионное приближение возможно применять в том случае, когда угол рассеяния частиц в результате акта однократного взаимодействия значительно меньше углов детектирования. Данная модель дает справедливые результаты при условии $R_0 \leq (0.1-0.2)l_{tr}$. Как показано в работе [24], данная теоретическая модель позволяет описать область «low energy tail» в энергетических спектрах Резерфордского обратного рассеяния при энергиях несколько сотен кэВ. В работах В. П. Афанасьева [35] данное приближение было с хорошей точностью использовано для количественного описания отражения электронов с энергиями в несколько МэВ.

1.1.3.2 Теория О. Б. Фирсова

Данная теоретическая модель справедлива в том случае, когда углы скольжения падающих на мишень частиц стремятся к нулю. В этом случае

уравнение (1.4) значительно упрощается и допускает решение граничной задачи с помощью преобразования Лапласа. Решение, полученное О. Б. Фирсовым [29,30], выглядит следующим образом:

$$N(\theta, \theta_0) = N_0 \frac{3 (\theta\theta_0)^{3/2}}{2\pi (\theta_0^3 + \theta^3)}, \quad (1.6)$$

где θ_0, θ – угол падения и отражения, отсчитываемый от поверхности мишени соответственно; N_0 – плотность потока падающих частиц.

Из данного решения следует, что максимальное количество отраженных частиц наблюдается, когда угол отражения частиц равен углу падения.

Развитие данная теория получила в работах В. С. Ремизовича [36–38], который получил точное решение граничной задачи для случая, когда средний квадрат угла рассеяния частиц не зависит от энергии частиц, что выполняется тогда, когда большая часть частиц вылетает из мишени с энергиями, близкими к начальной энергии частиц. Сравнение аналитических данных с экспериментальными корректно в том случае, когда энергетические распределения достаточно узкие и положение максимума распределения близко к начальной энергии частиц. Существенным недостатком данной модели является тот факт, что она не позволяет описать поток частиц, отразившийся от поверхности без потерь энергии.

1.1.3.3 Модель Бете

Модель Бете для задач рассеяния электронов была развита в работах Арчарда [39] и Томлина [40]. Для задач рассеяния ионов модель была развита в работах И. С. Тилинина [28]. Данная теоретическая модель рассматривает только случай падения потока частиц под углами, близкими к нормали к поверхности. Данная теоретическая модель заключается в том, что частицы движутся в мишени без неупругих потерь энергии до глубины, определяемой транспортной длиной пробега (до глубины в мишени, соответствующей глубине полной изотропизации потока), а затем, изменив направление движения на восходящее,

движутся, неупруго теряя энергию, но не испытывая упругие взаимодействия. Данная модель использовалась только для определения интегральных характеристик рассеяния – полных коэффициентов отражения. Удовлетворительное согласие с экспериментом наблюдалось только для атомных зарядов $Z > 29$. Обобщение данной модели для описания энергетических спектров отраженных ионов было осуществлено в работах Тилинина. Дополнительным недостатком данной модели является отсутствие частиц, отразившихся от мишени без потерь энергии, что не позволяет использовать данную модель для определения компонентного состава мишеней на основе ионной и электронной спектроскопии.

1.1.3.4 Модель, основанная на процедуре линеаризации уравнений инвариантного погружения

В данной теоретической модели [27] была решена граничная задача для уравнения переноса частиц методом инвариантного погружения. Была проведена линеаризация уравнения для функции отражения путем пренебрежения нелинейным слагаемым.

Наиболее эффективным методом решения уравнений, в которых содержатся угловые переменные, является метод сферических гармоник. Одной из критических процедур при решении является аналитическое продолжение интегралов (изначально определенных на интервале $(-1;0)$, либо $(0;1)$) в область интегрирования $(-1;1)$, в которой ортогональны полиномы Лежандра. В данной модели эта процедура была построена на использовании дифференциального сечения упругого рассеяния, имеющего вид $\omega'_{el}(\mu_0, \mu) (0 < \mu_0 < 1, -1 < \mu < 0) = \omega_{el}(\mu_0, \mu) - \sigma_{el} \delta(\mu_0 - \mu)$, что позволило расширить пределы интегрирования. Данная методика позволила количественно решить задачи по отражению электронов и ионов в том случае, когда R_0/l_{tr} не превышает 0.1. Методика позволила описать отражение легких ионов с энергией, превышающей десятки кэВ, и электронов с энергией в несколько МэВ [35]. Процессы отражения электронов с энергией в

несколько кэВ и ионов с энергией меньше нескольких кэВ данная методика позволила описать только качественно.

1.1.3.5 Модель С. Э. Боромянского

С. Э. Боромянским было получено точное решение граничной задачи для нелинейного интегро-дифференциального уравнения переноса [41]. В качестве сечения упругого рассеяния была использована «игольчатая» индикатриса:

$$x_{el}(\mu_0, \mu) = \frac{f}{f+b} \delta(\mu_0 - \mu) + \frac{b}{f+b} \delta(\mu_0 + \mu), \quad (1.7)$$

где $\frac{f}{f+b}$ – вероятность рассеяния «вперед»; $\frac{b}{f+b}$ – вероятность рассеяния «назад».

Индикатриса (1.7) из континуума направлений движения атомной частицы после акта упругого рассеяния разрешает только два: прямо вперед и точно назад под углом 180° от первоначального направления движения. Ее следует отнести к классу модельных индикатрис.

Решение, полученное для нелинейного уравнения, имеет вид:

$$R(s) = \frac{\exp(-ts)}{s} I_1(ts), \quad (1.8)$$

где s – пробег частиц в мишени; t – параметр вытянутости сечения; I_1 – модифицированная функция Бесселя.

Решение, полученное для линеаризованного уравнения, имеет вид:

$$R(s) = \frac{t}{2} \exp(-ts). \quad (1.9)$$

Полученные аналитические решения позволили выяснить, при каких условиях возможно пренебречь нелинейным слагаемым в уравнении для функции отражения. Параметр $t = \frac{b}{f+b}$ определяет степень вытянутости сечения вперед. Было установлено, что при $t \sim 0.01$, пренебрежение нелинейным слагаемым погрешности в результат не вносит.

1.2 Методы компьютерного моделирования

Большинство программ компьютерного моделирования процессов взаимодействия частиц с поверхностью твердого тела основано на приближении парных столкновений, в рамках которого движение атома в твердом теле рассматривается как последовательность парных столкновений. Приближение парных столкновений является первым модельным подходом, применявшимся к анализу процессов, вызываемых ионной бомбардировкой твердых тел.

Программы, построенные на основе данного приближения, подразделяют на две категории. Первая – программы Монте-Карло, в которых бомбардируемая мишень представляет собой бесструктурный объект, для которого положение рассеивающего центра для каждого следующего акта столкновения определяется случайным числом. Вторая категория программ написана для мишеней с кристаллической структурой, для которых положения возможных рассеивающих центров фиксированы и известны.

Приведем список программ Монте-Карло: TRIM [42], TRIM.SP [43], TRIM.85, ACAT, BABOUM, BEST, CASCADE, DYACAT, ERPEX, EVOLVE, HERAD, HIDOS, IMPLNT, ITMC, PERST, PIBER, RITA, ROMEO, SASAMAL, SAVOY, TCIS, TRIDYN, TRIPOS, обзор которых представлен в книге [7].

В большинстве программ используется газовая модель, в некоторых – жидкостная. В одних программах используется функция плотности вероятности для прицельного параметра; в других – функция плотности вероятности для угла рассеяния; в-третьих – метод сопряженного потенциала. Для определения максимального прицельного параметра используется цилиндрическая, трехмерная сферическая, двумерная или одномерная схема. В различных программах используются различные законы описания средней длины свободного пробега частиц; различные потенциалы взаимодействия частиц с атомами мишени – кулоновский, Томаса-Ферми, Бора, Мольера, Кр-С и другие.

В программах для кристаллических мишеней [7] (MARLOWE [44], OKSANA [45], ACOCT, ARGUS, BACKS, CASCADE, CENTAUR, COSIPO, EDI, FLUX, MORLAY, RECOIL, RETTUPS, TAVERN) на каждом этапе взаимодействия происходит выборка рассеивателя, учитываются одновременные столкновения, временные зависимости, столкновения между движущимися атомами, рассматривается кинематика неупругого взаимодействия. Большинство программ учитывает тепловое колебание атомов мишени.

Справедливость применения приближения парных столкновений нарушается при низких энергиях порядка нескольких эВ, для которых важно учитывать многочастичные эффекты. В области низких энергий более аккуратно работает метод молекулярной динамики [46].

1.3 Методы анализа водорода и его изотопов в поверхности твердых тел

Определение профилей водорода (в общем случае – изотопов водорода) в материалах, обращенных к термоядерной плазме, имеет важное значение. Насыщение водородом поверхностей материалов существенно повышает их химическую активность. Аномально высокая скорость диффузии водорода в металлах приводит к изменению их свойств по всему массиву образца. Рассмотрим существующие методы анализа как сорбированного, так и связанного водорода, и его изотопов.

1.3.1 Вторичная ионная масс-спектрометрия

Вторичная ионная масс-спектрометрия [47] (ВИМС, Secondary Ion Mass Spectrometry, SIMS) позволяет реализовывать качественный анализ состава поверхности твердых тел путем ионного распыления атомов и молекул верхних слоев, а затем анализа с помощью масс-спектрометра. Несмотря на то что в процессе распыления могут выделяться атомы в разнообразных возбужденных состояниях, включая нейтральные атомы и ионы с различными зарядами, ВИМС

фокусируется на анализе положительно заряженных ионов. На сегодняшний день считается, что исследование масс-спектра распыленных частиц является одним из самых чувствительных методов для изучения состава поверхности [48,49].

Для реализации высокочувствительного изотопного анализа в ВИМСе используются узко сфокусированные ионные пучки. Максимальное пространственное разрешение составляет 50 нм. Повышения коэффициента распыления достигают путем направления ионных пучков под скользящими углами к поверхности мишени и снижения энергии ионов до такого значения, чтобы они не проникали глубже нескольких нанометров. В таком случае разрешение по глубине составляет порядка 1 нм. Современные установки ВИМС обеспечивают среднюю чувствительность не менее 0.01 частицы на миллион.

Динамическое распыление материала с поверхности позволяет восстанавливать послойные профили элементного состава. Для этого необходимо иметь данные по скорости распыления и разрешения по глубине, которые измеряются экспериментально с использованием тестовых образцов с дельта-слоями, находящимися на известных глубинах. Толщины слоев и скорости осаждения калибруются с использованием независимых методов, таких как оптическая эллипсометрия. При этом необходимо учитывать параметры ионного распыления, неоднородность кратера при распылении, углы падения ионного пучка, массы ионов и их энергию. Также следует помнить, что процесс ионного распыления носит стохастический характер, что может увеличивать погрешность в измерениях послойных распределений.

Несмотря на широкое применение ВИМС в различных областях науки и техники, таких как микро- и наноэлектроника для определения малых концентраций примесей в полупроводниках [50], метод имеет свои ограничения. Использование масс-спектрометра позволяет разделить сигналы изотопов, таким образом осуществить изотопный анализ образцов с высоким разрешением по

глубине, что делает его ключевым методом для качественного анализа изотопов водорода в материалах термоядерных устройств [51,52].

Тем не менее, метод ВИМС обладает существенными недостатками: его разрушительная природа, зависимость чувствительности от кристаллической структуры, высокая сложность и трудоемкость калибровки, а также стохастический характер ионного распыления, что затрудняет воспроизводимость результатов.

1.3.2 Термодесорбционная спектроскопия

Термодесорбционная спектроскопия (ТДС, Thermo Desorption Spectroscopy, TDS), заключается в измерении масс-спектров остаточных газов в вакуумной камере с образцом, подвергаемым нагреву. Основная цель метода — исследование процессов сорбции и десорбции на поверхности, что позволяет определить количество сорбированных элементов, энергию связи атомов и молекул, энергию активации десорбции и порядок кинетики этого процесса.

ТДС используется для измерения концентрации изотопов водорода, накопленных в поверхностях материалов термоядерных устройств. С его помощью были получены зависимости парциального давления водорода, дейтерия, трития и кислорода от температуры, что стало основой оценки сорбционной емкости материалов «первой стенки» термоядерных устройств [53–57].

Десорбцию можно ускорить не только термически, но и воздействием излучения. Известно, что давление остаточных газов в вакуумных камерах значительно снижается при облучении образцов рентгеновскими, электронными или лазерными пучками. Эти процессы легли в основу лазерной десорбционной спектроскопии и электронно-стимулированной десорбционной спектроскопии [58], которые исследуют локальную сорбционную емкость и изменения элементного состава на поверхности.

ТДС обладает высокой чувствительностью к изотопному составу, однако интерпретация результатов может быть сложной. Ошибки в анализе данных ТДС часто возникают из-за неравномерного нагрева образца и камеры, флуктуаций скорости нагрева и откачки вакуумной системы, а также наличия фоновый паров водорода в масс-спектре. Главным недостатком ТДС является тот факт, что с помощью данного метода возможно исследование только сорбированного водорода (не связанного).

1.3.3 Метод ядерных реакций

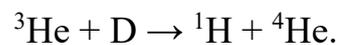
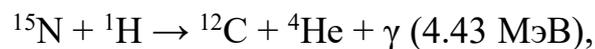
Метод ядерных реакций (Nuclear Reaction Analysis, NRA) [59] базируется на измерении и анализе спектров вторичных частиц или γ -лучей, образующихся в результате ядерных реакций, вызванных бомбардировкой поверхности ускоренными частицами. NRA метод позволяет восстановить изотопный состав поверхностей, содержащих легкие элементы.

В NRA методе используются ионы с достаточно высокой энергией, способные преодолеть кулоновский барьер атомов на поверхности. Обычно продуктами ядерной реакции являются протоны, нейтроны, α -частицы или γ -лучи, энергия которых зависит от энергии первичного ионного пучка. Метод ядерных реакций также называют методом ядерного резонансного анализа (Nuclear Resonant Analysis), поскольку при определённых энергиях наблюдается упругий резонанс для конкретных реакций, когда продуктом реакции является ион с такой же массой и зарядом, что и сталкивающийся ион. В этом случае интенсивность выбитых частиц значительно возрастает из-за высокого сечения взаимодействия.

Метод ядерных реакций широко применяется для измерения послойных профилей примесей в поверхности твердых тел и обладает высокой чувствительностью в приповерхностных слоях. Максимальное разрешение этого метода по глубине составляет 1–5 ангстремов, чувствительность – 50 частиц на миллион, а предельная глубина анализа достигает 5–7 мкм.

Интерпретация результатов метода ядерных реакций выполняется на основе кинетических уравнений реакций (закон сохранения энергии). Выход реакции определяется сечением взаимодействия, которое вычисляется и известно для большинства реакций. Однако анализ может усложниться из-за высокой энергии налетающих частиц (более 1 МэВ), что приводит к возникновению квантовых эффектов и побочных реакций, которые искажают измеряемый спектр.

Метод ядерных реакций применяется для измерения послонных концентраций изотопов водорода в материалах стенок термоядерных устройств на основе резонансных реакций:



Существуют многочисленные работы [60–63], посвященные анализу содержания изотопов водорода в поверхностях материалов термоядерных устройств, обращенных к плазме.

Преимуществом метода ядерных реакций является возможность восстановления послонного профиля изотопного состава легких элементов. Тем не менее, основным недостатком является выборочный характер ядерных реакций: для определения каждого элемента необходима своя реакция. Потребность в различных ускорителях для анализа разных элементов делает этот метод одним из самых дорогостоящих, а установки — габаритными и опасными с точки зрения радиации. Высокая энергия падающих ионов также может вызывать процессы эрозии поверхности, что делает данный метод разрушительным.

1.3.4 Спектроскопия атомов отдачи

Спектроскопия атомов отдачи (Elastic Recoil Detection, ERD) [10] осуществляется путем бомбардировки мишени ионными пучками, направленными под скользящими углами к поверхности, причем массовое число налетающих частиц должно быть больше массового числа частиц мишени. При

бомбардировке мишени более тяжелыми частицами происходит выбивание атомов поверхности, имеющих меньшую массу. Количественный анализ проводится по энергетическим спектрам атомов отдачи, зарегистрированных детектором. Энергию частицы отдачи рассчитывают на основе законов сохранения энергии и импульса классической механики:

$$E_2 = \frac{4M_1M_2}{(M_1+M_2)^2} E_0 \cos^2 \psi, \quad (1.10)$$

где ψ – угол между направлением падения налетающего пучка ионов и детектором атомов отдачи.

Исследования концентрации водорода и дейтерия методом атомов отдачи представлены в работах [64,65].

Выполнение измерений под скользящими углами к поверхности значительно снижает глубину анализа до 100-200 нм. Чувствительность метода для поверхностных слоев составляет 10^{14} атомов/см², а разрешение по глубине варьируется от 1 до 10 нм. Экспериментальная реализация данной методики требует наличия ускорительного оборудования до энергии в несколько МэВ.

1.3.5 Методы электронной спектроскопии

1.3.5.1 Спектроскопия характеристических потерь энергии электронов

Спектроскопия характеристических потерь энергии электронов (СХПЭЭ) – метод анализа поверхности твердых тел, в рамках которого исследуются спектры потерь энергии электронов в диапазоне от 0 до 100 эВ для различных материалов, что позволяет получать информацию об их структуре. Анализ спектров в области энергий плазменных колебаний предоставляет информацию о неупругих свойствах поверхности.

Спектроскопия характеристических потерь энергии применяется для определения спектра колебания плазмы твердого тела под воздействием внешнего излучения. Под плазмой твердого тела понимается совокупность

носителей заряда. Частота объемных (bulk) плазменных колебаний определяется следующим выражением:

$$\omega_{pl_B} = \sqrt{\frac{4\pi e^2 n_0}{m}}, \quad (1.11)$$

где m – масса электрона; n_0 – концентрация свободных электронов.

Частота поверхностных (surface) плазменных колебаний определяется выражением:

$$\omega_{pl_S} = \frac{\omega_{pl_B}}{\sqrt{1+\epsilon_1}}, \quad (1.12)$$

где ϵ_1 – диэлектрическая проницаемость среды.

Плазменные колебания подчиняются законам дисперсии, что означает, что затухание плазмонов определяется мнимой частью диэлектрической проницаемости материала, и спектр элементарных колебаний содержит информацию о его диэлектрической функции.

Вопросы интерпретации спектров СХПЭЭ подробно рассматриваются в работах [66–70]. Метод СХПЭЭ используется для получения данных об однократном (дифференциальное сечение неупругого рассеяния электронов) и многократном неупругом рассеянии электронов в материалах, что необходимо для правильной интерпретации спектров электронной спектроскопии и рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии. В исследованиях [71,72] представлен подход, позволяющий из спектров СХПЭЭ восстанавливать параметр поверхностного возбуждения (Surface Excitation Parameter). Работы [73,74] посвящены методам восстановления дифференциальных сечений неупругого рассеяния электронов на основе спектров СХПЭЭ.

Положение плазменных пиков в спектрах СХПЭЭ может содержать информацию о фазовом состоянии поверхности. Концентрация свободных электронов, определяющая положение пика, позволяет, зная химический состав (например, из данных РФЭС) и количество свободных электронов в атомах, рассчитать концентрацию вещества и на этой основе определить его фазовое состояние.

Основное преимущество метода заключается в возможности восстановления дифференциальных по энергии сечений неупругого рассеяния электронов. Определение профилей изотопов водорода с помощью методов электронной спектроскопии требует реализацию процедуры вычитания фона неупруго рассеянных электронов. Сечения, описывающие данный фон, восстанавливаются из спектров СХПЭЭ.

1.3.5.2 Спектроскопия отраженных электронов

При реализации спектроскопии отраженных электронов (СОЭ, Reflected Electron Spectroscopy, RES) измеряется и анализируется так называемая «купольная» часть энергетических спектров отраженных электронов. Данный метод позволяет исследовать послойный состав многослойных мишеней [75].

Информационная глубина СОЭ определяется транспортной длиной пробега электронов в твердом теле, то есть длиной полной изотропизации электронного потока, которая определяется составом материала и начальной энергией электронов. Характерные энергии зондирования методом СОЭ находятся в диапазоне 3-50 кэВ, что позволяет исследовать мишени на глубину до нескольких мкм.

Теоретические основы интерпретации спектров отраженных электронов были разработаны В. П. Афанасьевым в Московском Энергетическом Институте [27]. Форма и положение «купольной» части энергетического спектра зависит от зарядового числа атомов мишени [76]. Послойные профили исследуемого материала определяются путем процедуры подбора. Рассчитываются энергетические спектры электронов, отраженных от полубесконечных материалов исследуемой мишени. Затем в рамках слоистой мишени подбирается конфигурация профилей мишени, дающая расчетный спектр, совпадающий с экспериментальным. Расчет энергетических спектров электронов, отраженных от полубесконечных мишеней, строится на основе решения граничной задачи для уравнения переноса электронов в данном материале. Для реализации

данного расчета необходимо иметь данные по упругим и неупругим потерям энергии электронов в рассматриваемом материале.

Преимуществами метода СОЭ является возможность количественного восстановления послойных профилей исследуемой мишени (в том числе и водорода) до глубин, достигающих микронных значений. Экспериментальная реализация метода СОЭ не требует серьезных материальных затрат в отличие от методов NRA и ERD. Недостатком метода является невозможность изотопного анализа, что связано с тем, что форма энергетических спектров зависит от зарядового числа, а не от массы. Это ограничение снимается другим оригинальным методом электронной спектроскопии – спектроскопия пиков упруго отраженных электронов.

1.3.5.3 Спектроскопия пиков упруго отраженных электронов

Спектроскопия пиков упруго отраженных электронов (СПУОЭ, Elastic Peak Electron Spectroscopy, EPES) [77] – это относительно новый метод анализа поверхности, впервые рассмотренный в 1967 году, но получивший широкое распространение только в начале 21-го века в связи с появлением энергоанализаторов с высоким энергетическим разрешением, что позволило наблюдать пики упруго отраженных электронов в условиях, удовлетворяющих критерию Рэля [78]. С возникновением нового метода анализа поверхности открылась возможность на основе электронной спектроскопии определять атомы исследуемой мишени по величине атомного веса. Широкий спектр приложений новой разновидности электронной спектроскопии был ярко продемонстрирован в работах Мартена Воса [11,79–81], который назвал данную методику электронным Rutherford back scattering – ERBS. Преимуществом СПУОЭ относительно других методик количественного анализа поверхности является неразрушающая природа метода, возможность исследовать поэлементный и изотопный состав материала в приповерхностных слоях, т.е. на глубинах, не превышающих величину l_{in} – среднюю длину свободного пробега

между двумя актами неупругого соударения, возможность фиксировать в материале изотопы водорода и гелия.

Рассмотрим физическое описание метода СПУОЭ. Электроны с некоторой начальной энергией направляются в сторону поверхности исследуемого образца. Рассеиваясь на атомах поверхности, часть электронов упруго теряет энергию, которая определяется по законам сохранения энергии и импульса классической механики. Величина потерь энергии электрона, испытавшего однократное упругое рассеяние, вычисляется согласно следующей формуле:

$$\Delta = \frac{2m_e}{M} E_0 (1 - \cos \theta), \quad (1.13)$$

где Δ – упругие потери энергии электрона; m_e – масса электрона; M – масса атома поверхности, на котором происходит рассеяние; E_0 – начальная энергия электрона; θ – угол рассеяния.

Электроны, рассеиваясь на ядрах с различной массой, будут иметь различные потери энергии, что следует из формулы потерь энергии (1.13). Таким образом, методом СПУОЭ можно анализировать как атомный состав поверхности, так и изотопный.

Практическая реализация метода осуществляется следующим способом. Поток электронов, созданный электронной пушкой, рассеивается на атомах поверхности, а затем собирается энергоанализатором, установленным либо над поверхностью образца, либо за образцом, в зависимости от того, на отражение или на пропускание направлен эксперимент. Электроны, собранные энергоанализатором, регистрируются в энергетическом спектре отраженных электронов, причем каждый пик упругих потерь энергии электронов соответствует атому, на котором произошло упругое рассеяние.

Из анализа формулы для потерь энергии (1.13) следует, что водород, обладающий наименьшей атомной массой, имеет наибольший сдвиг упругого пика. Поэтому упругие пики изотопов водорода хорошо разрешены, однако, упругий пик водорода часто попадает в область потерь энергии, образованную

неупруго рассеянными электронами. Поэтому при вычислении площади под пиком, сформированным упруго отраженными электронами, необходимо вычесть фон, созданный неупруго рассеянными электронами. Методы решения этой задачи представлены в [82–85].

Площадь под пиком, сформированным упруго отраженными электронами, определяется как дифференциальным сечением упругого рассеяния электронов – σ_{el} , так и величиной альбедо для однократного рассеяния – $\lambda = \frac{\sigma_{el}}{\sigma_{el} + \sigma_{in}}$, где σ_{in} – дифференциальное сечение неупругого рассеяния электронов. Значения дифференциальных сечений упругого рассеяния электронов для различных элементов и различных энергий зондирующих электронов в свободном доступе предоставлены в базе данных НИСТ (Национальный институт стандартов и технологий США) [8]. Площадь под пиком, сформированным упруго отраженными электронами, по сути, является интенсивностью пика упруго отраженных электронов, таким образом, зная значения дифференциального сечения упругого рассеяния и альбедо упругого рассеяния, можно рассчитать интенсивность пиков упруго отраженных электронов.

Количественный анализ результатов, полученных методом СПУОЭ, осуществляется на основе двух величин: отношение площадей под пиками упруго отраженных электронов и информационной глубине – d_{inf} . Информационная глубина оценивается по средней длине неупругого пробега l_{in} и геометрии рассеяния:

$$d_{inf} = \frac{l_{in}(E)}{\frac{1}{\cos \mu_0} + \frac{1}{\cos \mu}}, \quad (1.14)$$

где μ_0 – косинус угла падения электронов; μ – косинус угла отражения электронов.

Величина средней длины неупругого пробега электронов чаще всего рассчитывается по формуле TRP – 2M [86].

Метод СПУОЭ развивался исторически в нескольких направлениях. Основные результаты, полученные с его помощью, описаны в работах [87–90].

Высокие требования к экспериментальному оборудованию, не позволяющие разрешать пики от отдельных элементов на установках с низким энергетическим разрешением, способствовали развитию исследований угловых зависимостей пиков упруго отраженных электронов [91–92]. В России метод СПУОЭ активно развивали Бронштейн, Пронин, Макаров, Игонин, Афанасьев и другие исследователи [89, 90, 93–95]. Долгое время основной целью применения метода считалось получение экспериментальных данных о средней длине неупругого пробега и уточнение формулы TPP-2M. Метод СПУОЭ для послойного элементного анализа поверхности начал активно использоваться только в начале 21 века благодаря исследованиям Мартена Воса в Австралийском Национальном Университете. С его помощью удалось измерить пики упруго отраженных электронов от водорода. Количественная расшифровка энергетических спектров СПУОЭ строилась на основе моделирования методом Монте-Карло. Первые работы, посвященные расшифровке сигналов СПУОЭ с помощью аналитических методик, были заложены в работах В. П. Афанасьева. Развитие данные методики нашли в работах автора настоящей диссертационной работы.

Метод СПУОЭ, относительно методов NRA и ERD, обладает уникальными преимуществами, такими как неразрушающая природа метода, относительно недорогая экспериментальная реализация на промышленно выпускаемом оборудовании и возможность восстановления послойных профилей элементного и изотопного состава, в том числе и водорода.

1.4 Рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия

Рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия (РФЭС, X-Ray Photoelectron Spectroscopy, XPS) – самый популярный метод анализа атомного и молекулярного состава поверхности твердых тел в современной электронной спектроскопии. Благодаря возможностям количественного анализа поверхности, этот метод также называют электронной спектроскопией для химического анализа (Electron Spectroscopy for Chemical Analysis). РФЭС метод получил

широкое признание и подробно описан в многочисленных российских и зарубежных обзорах [14, 96–98].

Физическая основа метода РФЭС – явление фотоэффекта. Поверхность исследуемого образца подвергается воздействию рентгеновского излучения, которое поглощается атомами поверхности, а релаксация происходит вследствие испускания фотоэлектронов. Энергия фотоэлектрона, определяющаяся разностью энергии зондирующего поверхность фотона и энергии связи электрона в атомной оболочке, является характерной величиной, однозначно определяющей элемент, на атомах которого произошло явление фотоэффекта. Среди недостатков метода следует отметить невозможность детектирования водорода и гелия.

Оборудование для РФЭС включает источник рентгеновского излучения и электронный энергоанализатор, при этом измерения проводятся в условиях высокого или сверхвысокого вакуума. Чаще всего используются рентгеновские трубки с анодами из магния (Mg, 1253.6 эВ) и алюминия (Al, 1486.6 эВ), что ограничивает глубину анализа до 10-100 ангстрем в зависимости от материала.

Метод РФЭС позволяет проводить количественный анализ химического состава поверхности (за исключением водорода и гелия). Энергия связи электрона зависит от химического состояния атома, что делает РФЭС удобным для анализа химических связей в молекулах или между атомами (например, при исследовании оксидирования). По сдвигу пика можно определить тип связи и восстановить молекулярную структуру поверхности.

Интенсивность пиков фотоэлектронов в энергетическом спектре РФЭС зависит от многих факторов, таких как сечение фотоионизации, поток падающих фотонов, длина пробега фотоэлектрона в твердом теле, функция пропускания энергоанализатора и др. В настоящее время существует два метода количественной расшифровки сигналов РФЭС – традиционный Peak Shape Analysis (PSA) [14,99], в рамках которого анализируются фотоэлектронные пики, и Photo Electron Spectra analysis (PES), в рамках которого наряду с

фотоэлектронными пиками анализируется область потерь энергии фотоэлектронов. PSA – хорошо развитый метод, представленный в целом ряде работ [14], реализованный в большом количестве программных продуктов, таких как, например, CasaXPS [100]. Расшифровка РФЭС спектров на основе PSA метода позволяет проводить компонентный и химический анализ поверхности материалов на глубине, определяемой средней длиной свободного неупругого пробега фотоэлектронов. Попытки восстановить послойные профили элементов при помощи PSA анализа приводят к решению некорректной математической задачи. Ошибки, множество решений, которые возникают при восстановлении послойных профилей с помощью PSA метода, ярко проиллюстрированы в работах Тугаарда [15].

Реализация PES анализа, в отличие от PSA метода, представляет намного более сложную задачу, что связано с тем, что данный метод практически не представлен в современной научной литературе, отсутствуют программные продукты, расшифровывающие спектры РФЭС в широкой области потерь энергии фотоэлектронов, отсутствуют базы данных по дифференциальным сечениям неупругого рассеяния электронов даже для однокомпонентных мишеней.

Удачный пример реализации PES анализа можно найти в работах В. Вернера [101,102], который назвал данный метод методом парциальных интенсивностей. В настоящей диссертации будет построен метод парциальных интенсивностей, основой которого является аналитическое решение упругой задачи определения распределения плотности потока фотоэлектронов по длине пробега в мишени. Уравнение для функции плотности потока фотоэлектронов представляет собой решение граничной задачи для среды с равномерным распределением внутренних источников методом инвариантного погружения. Решение находится в малоугловом приближении.

Преимуществами метода РФЭС являются неразрушающий характер метода, возможность исследования элементного и химического состава самой поверхности материалов. Однако метод не подходит для изотопного анализа.

Глава 2. Аналитическое решение задачи отражения электронов и легких ионов в твердых телах

2.1 Уравнения переноса электронов и легких ионов

Процессы взаимодействия потоков ускоренных атомных частиц с твердыми телами далеки от термодинамического равновесия, их последовательное описание ведется на основе уравнения Больцмана, допускающего, в рассматриваемых задачах, трансформацию к уравнению переноса [5]. Уравнение Больцмана записано для функции распределения $f(\vec{r}, \vec{p}, t)$, которая для случая термодинамического равновесия определяется как функция распределения Максвелла. Уравнение переноса определяет плотность потока частиц:

$$N(\vec{r}, \vec{p}, t) = v \cdot f(\vec{r}, \vec{p}, t), \quad (2.1)$$
$$\vec{v} = \vec{p}/m,$$

где величина $N(\vec{r}, \vec{p}, t)$ равна числу частиц с импульсом \vec{p} , пересекающих за одну секунду единичную площадку в окрестности точки с координатой \vec{r} , ориентированную перпендикулярно к направлению движения частиц $\vec{n} = \vec{p}/p$. В отличие от термодинамически равновесных ситуаций в данной работе рассматриваются ситуации, далекие от термодинамического равновесия. Описание данных процессов будет вестись на основе кинетического подхода в основе которого лежат уравнения переноса. В отличие от уравнения Больцмана уравнения переноса имеют дело с задачами, в которых частицы одной из двух взаимодействующих подсистем покоятся. В решаемых задачах вторая подсистема будет твердым телом.

Для описания транспорта частиц необходимо сделать следующие допущения:

1. пренебрегаем зависимостью потока частиц от координат x и y и ограничиваемся зависимостью от координаты z , направленной в глубь мишени. Такое допущение можно сделать, если площадь поверхности

исследуемого образца, на которую падает пучок частиц, намного больше площади поверхности, с которого фиксируется сигнал;

- используем гипотезу Ферми, которая гласит, что для быстрых атомных частиц возможно разделение процесса рассеяния на два независимых канала: упругое рассеяние, происходящее на ядрах, и неупругое рассеяние, происходящее на электронных оболочках, т.е. допустимо представление дифференциального сечения в виде:

$$\begin{aligned} \omega(E, \Delta, \mu_0, \mu, \varphi_0, \varphi) = \omega_{in}(E, \Delta) \delta(\mu_0 - \mu) \delta(\varphi_0 - \varphi) + \\ \omega_{el}(E, \mu_0, \mu, \varphi_0, \varphi) \delta(\Delta), \end{aligned} \quad (2.2)$$

где ω – полное дифференциальное сечение рассеяния; ω_{in} – дифференциальное по энергии элементарное сечение неупругого рассеяния; ω_{el} – дифференциальное по углам элементарное сечение упругого рассеяния; $E = E_0 - \Delta$ – энергия частиц; E_0 – начальная энергия частиц; $\Delta = E_0 - E$ – потери энергии частиц; μ_0 – косинус полярного угла падения θ_0 : $\mu_0 = \cos \theta_0$; μ – косинус полярного угла отражения θ : $\mu = \cos \theta$; φ_0, φ – азимутальные углы; δ – дельта-функция (функция Дирака);

- принимая односкоростное приближение, т.е. свойства рассеивающей среды определяются начальной энергией частиц и не меняются при движении их в веществе:

$$\omega_{el}(E, \mu_0, \mu, \varphi_0, \varphi) \approx \omega_{el}(E_0, \mu_0, \mu, \varphi_0, \varphi) \approx \omega_{el}(\mu_0, \mu, \varphi_0, \varphi). \quad (2.3)$$

Условие (2.2) позволяет разделить процесс рассеяния атомной частицы на два независимых канала – упругий канал, в котором происходит изменение направления движения частицы, и неупругий канал, в котором происходит потеря энергии частиц без изменения направления ее движения. Соответственно можно рассматривать два независимых уравнения переноса. Уравнение упругого переноса, определяющего плотность потока частиц $N(\vec{r}, \vec{n})$, движущихся в заданной точке пространства \vec{r} в заданном направлении \vec{n} . Уравнение неупругого переноса, определяющего плотность потока частиц $N(\vec{r}, \Delta)$, движущихся в заданной точке пространства \vec{r} с заданной потерей

энергии Δ . Построим вывод уравнений переноса не из уравнения Больцмана, а пользуясь простой геометрией начальных условий.

Начнем с уравнения упругого переноса. Пусть в безграничной среде, в плоскости $z = 0$ имеется поток частиц, движущихся по параллельным траекториям в направлении \vec{n}_0 : $N(0, \vec{n}) = \delta(\vec{n} - \vec{n}_0)$. Допустим, что функция $N(z, \vec{n})$ известна. Определим, как изменится плотность потока частиц после прохождения потоком расстояния dz :

$$N(z + dz, \vec{n}) - N(z, \vec{n}) = -\sigma_{el} n \frac{dz}{\mu} N(z, \vec{n}) + n \frac{dz}{\mu} \int_{-1}^1 \int_0^{2\pi} \omega_{el}(\vec{n}' \rightarrow \vec{n}) N(z, \vec{n}') d\mu' d\varphi', \quad (2.4)$$

где $\sigma_{el} = 2\pi \int_{-1}^1 \omega_{el}(\mu) d\mu$ – полное сечение упругого рассеяния; n – концентрация атомов мишени.

Правая часть уравнения (2.4) как и в случае уравнения Больцмана называется «интеграл столкновений». Первое слагаемое правой части уравнения (2.4) описывает процесс убывания частиц в потоке, движущимся в направлении \vec{n} . Частица данного потока, испытав упругое рассеяние, описываемое сечением σ_{el} , продолжит движение в направлении, отличном от \vec{n} . Второе слагаемое правой части уравнения (2.4) описывает прибыль потока частиц, движущихся в направлении \vec{n} , за счет упругого рассеяния частиц на угол $\vec{n}' \rightarrow \vec{n}$. Частицы, двигающиеся в направлении \vec{n}' , за счет упругого рассеяния на угол $\vec{n}' \rightarrow \vec{n}$ продолжат движение в направлении \vec{n} . Перейдем к безразмерной координате $\tau = z/l_{el}$, где $l_{el} = 1/n\sigma_{el}$ – средняя длина свободного пробега частицы между двумя актами упругого рассеяния; n – концентрация атомов мишени:

$$\mu \frac{\partial N(\tau, \vec{n})}{\partial \tau} = -N(\tau, \vec{n}) + \int_{-1}^1 \int_0^{2\pi} x_{el}(\vec{n}' \rightarrow \vec{n}) N(\tau, \vec{n}') d\mu' d\varphi', \quad (2.5)$$

где $x_{el}(\vec{n}' \rightarrow \vec{n}) = \omega_{el}(\vec{n}' \rightarrow \vec{n})/\sigma_{el}$ – нормированное дифференциальное сечение упругого рассеяния или индикатриса упругого рассеяния.

Аналогично выводу уравнения упругого переноса (2.5) приведем вывод уравнения неупругого переноса. Следуя принципу независимости процессов

упругого и неупругого рассеяния, помним, что в результате неупругих процессов происходит лишь потеря энергии частицы без изменения направления ее движения. Как и при выводе уравнения (2.5) рассмотрим безграничную среду, в которой, в плоскости $z = 0$ имеется поток частиц с одинаковой энергией и нулевой потерей энергии $\Delta = 0$; $N(z, \Delta)_{z=0} = \delta(\Delta)$. Допустим, что функция $N(z, \Delta)$ известна. Определим, как изменится плотность потока частиц после прохождения потоком расстояния dz :

$$N(z + dz, \Delta) - N(z, \Delta) = -\sigma_{in} n dz N(z, \Delta) + n dz \int_0^{\Delta} \omega_{in}(\varepsilon) N(z, \Delta - \varepsilon) d\varepsilon, \quad (2.6)$$

где $\sigma_{in} = \int_0^{E_0} \omega_{in}(\Delta) d\Delta$ – полное сечение неупругого рассеяния.

Первое слагаемое правой части уравнения (2.6) описывает процесс убывания частиц в потоке, имеющих потерю энергии Δ . Частица данного потока, испытав неупругое рассеяние, описываемое сечением σ_{in} , продолжит движение с большей потерей энергии. Второе слагаемое правой части уравнения (2.6) описывает прибыль потока частиц с потерей энергии Δ за счет неупругого рассеяния частиц с энергией $\Delta - \varepsilon$ на величину энергии ε . Перейдем к безразмерной координате $\tau = z/l_{in}$, где $l_{in} = 1/n\sigma_{in}$ – средняя длина свободного пробега частицы между двумя актами неупругого рассеяния:

$$\frac{\partial N(\tau, \Delta)}{\partial \tau} = -N(\tau, \Delta) + \int_0^{\Delta} x_{in}(\varepsilon) N(\tau, \Delta - \varepsilon) d\varepsilon, \quad (2.7)$$

где $x_{in}(\Delta) = \omega_{in}(\Delta)/\sigma_{in}$ – нормированное дифференциальное сечение неупругого рассеяния или индикатриса неупругого рассеяния.

2.2 Решение граничной задачи для уравнения упругого переноса.

Определение функции распределения электронов и легких ионов по длине пробега

Введем сферическую систему координат, ось z которой направлена вглубь мишени, оси x и y лежат на ее поверхности. Пусть n_0 и n – направления влета и вылета частиц из мишени соответственно, μ_0 и μ – косинусы полярного угла θ влета и вылета соответственно, φ – азимутальный угол.

Введем обозначение $S(z, \Delta, \mu, \varphi)$ для дифференциальной плотности потока частиц, движущихся под углом $\Omega(\theta, \varphi)$ с энергией E ($\Delta = E_0 - E$ – потери энергии) на глубине z от поверхности образца. В дальнейшем будем рассматривать только функцию отражения частиц $R(z, \Delta, \mu, \varphi)$, пренебрегая рассмотрением функции пропускания частиц $T(z, \Delta, \mu, \varphi)$. Введем функцию упругого отражения $R(z, \mu, \varphi)$, равную отношению числа частиц, отраженных от полубесконечного слоя в единичный элемент телесного угла, к потоку падающих в фиксированном направлении Ω_0 частиц.

Для решения граничной задачи для уравнения переноса (2.5) его следует дополнить граничными условиями, учитывающими, что моноэнергетический, мононаправленный, широкий поток частиц падает на верхнюю границу:

$$\begin{aligned} R(0, \mu, \varphi) &= R_0 \delta(\mu - \mu_0) \delta(\varphi - \varphi_0), & 0 \leq \mu \leq 1 \\ R(d, \mu, \varphi) &= 0, & -1 \leq \mu \leq 0 \end{aligned} \quad (2.8)$$

Решение граничной задачи для уравнения упругого переноса (2.5) будет строиться на основе метода инвариантного погружения Амбарцумяна [18,19]. Метод инвариантного погружения заключается в следующем: рассматривается изменение функции отражения $R(z, \mu, \varphi)$ при добавлении к верхней границе материала тонкого слоя толщиной $dz \ll l_{el}$, что означает, что в этом слое могут происходить только процессы однократного упругого рассеяния. На рис. 2.1 представлена схема, иллюстрирующая возможные процессы, приводящие к изменению функции отражения $R(z, \mu, \varphi)$ при добавлении слоя толщиной dz .

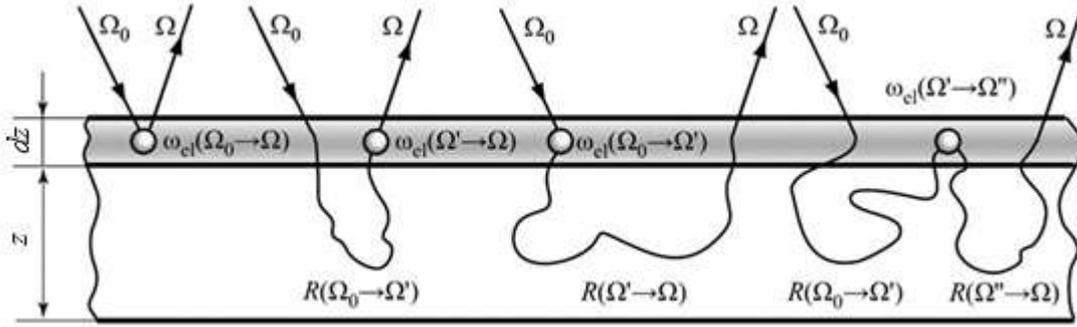


Рисунок 2.1 – Процессы, приводящие к изменению функции отражения $R(z, \mu, \varphi)$ при появлении полоски толщиной dz над слоем, со стороны падающего на слой потока. Белые кружки обозначают дифференциальное сечение упругого рассеяния $\omega_{el}(\mu, \varphi)$; прямые линии соответствуют функции $\exp(-z/\mu)\delta(\mu-\mu')\delta(\varphi-\varphi')$; кривые линии, описывающие переход нисходящего движения частицы в восходящее, соответствуют функции отражения частиц от полубесконечного слоя $R(z, \mu, \varphi)$

Изменение функции отражения записывается следующим образом:

$$\begin{aligned}
 R(z + dz, \mu_0, \mu, \varphi_0, \varphi) &= R(z, \mu_0, \mu, \varphi_0, \varphi) e^{-\frac{dz}{\mu_0} \left(\frac{1}{\mu_0} + \frac{1}{\mu} \right)} + \\
 &+ \omega_{el}(\mu_0, \mu, \varphi_0, \varphi) ndz \cdot \delta(z) + ndz \int_0^{2\pi} d\varphi' \int_{-1}^0 R(z, \mu_0, \mu', \varphi_0, \varphi') \omega_{el}(\mu', \mu, \varphi', \varphi) \frac{d\mu'}{\mu'} + \\
 &+ ndz \int_0^{2\pi} d\varphi' \int_0^1 \omega_{el}(\mu_0, \mu', \varphi_0, \varphi') R(z, \mu', \mu, \varphi', \varphi) \frac{d\mu'}{\mu'} + \\
 &+ ndz \int_0^{2\pi} d\varphi' \int_0^{2\pi} d\varphi'' \int_0^1 \frac{d\mu'}{\mu'} \int_{-1}^0 R(z, \mu_0, \mu'', \varphi_0, \varphi'') \omega_{el}(\mu'', \mu', \varphi'', \varphi') R(z, \mu', \mu, \varphi', \varphi) \frac{d\mu''}{\mu''}.
 \end{aligned} \tag{2.9}$$

Левая часть уравнения (2.9) – изменение функции отражения, правая часть – математическая запись процессов, которые возникают за счет добавления тонкого слоя dz и изменяют направление движения частиц с Ω_0 на Ω .

Решение граничной задачи, определяющее функцию отражения $R(\tau, \mu_0, \mu, \varphi_0, \varphi)$, имеет вид:

$$\begin{aligned}
 \left(\frac{1}{\mu_0} + \frac{1}{\mu} \right) \left(1 + \frac{\partial}{\partial \tau} \right) R(\tau, \mu_0, \mu, \varphi_0, \varphi) &= x_{el}(\mu_0, \mu, \varphi_0, \varphi) \delta(\tau) + \\
 \int_0^{2\pi} d\varphi' \int_{-1}^0 R(\tau, \mu_0, \mu', \varphi_0, \varphi') x_{el}(\mu', \mu, \varphi', \varphi) \frac{d\mu'}{\mu'} +
 \end{aligned} \tag{2.10}$$

$$\int_0^{2\pi} d\varphi' \int_0^1 x_{el}(\mu_0, \mu', \varphi_0, \varphi') R(\tau, \mu', \mu, \varphi', \varphi) \frac{d\mu'}{\mu'} +$$

$$\int_0^{2\pi} d\varphi' \int_0^{2\pi} d\varphi'' \int_0^1 \frac{d\mu'}{\mu'} \int_{-1}^0 R(\tau, \mu_0, \mu'', \varphi_0, \varphi'') x_{el}(\mu'', \mu', \varphi'', \varphi') R(\tau, \mu', \mu, \varphi', \varphi) \frac{d\mu''}{\mu''},$$

где $\tau = \frac{z}{l_{el}}$ – безразмерный пробег частицы в мишени, измеренный в длинах

свободного пробега между двумя актами упругого соударения; $x_{el}(\mu) = \frac{\omega_{el}(\mu)}{\sigma_{el}}$ –

нормированное дифференциальное сечение упругого рассеяния или индикатриса упругого рассеяния.

Уравнение (2.10) – это нелинейное интегро-дифференциальное уравнение типа Рикатти. Аналитическое решение данного уравнения представляет непростую задачу. Для упрощения уравнения (2.10) применим малоугловое приближение, подразумевающее малость параметра:

$$\zeta = \frac{\omega_{el}(\pi)}{\omega_{el}(0)} \ll 1. \quad (2.11)$$

На справедливость малоуглового приближения для решения задач рассеяния электронов в твердых телах указано в работах [103,104], где проведено сравнение точного численного решения уравнения (2.10) и аналитического решения, полученного в рамках малоуглового приближения. Малоугловое приближение справедливо в задачах рассеяния электронов в силу «сильной вытянутости» индикатрисы упругого рассеяния или, другими словами, наличия резкого максимума в сечении упругого рассеяния электронов при малых углах рассеяния. Условие (2.11) позволяет пренебречь последним нелинейным слагаемым в уравнении (2.10). Стоит отметить, что малоугловое приближение справедливо для легких ионов в более широком интервале энергий, чем для электронов. Связано это с тем, что параметр экранирования (определяющий сечение упругого рассеяния), определяемый квадратом отношения волны де Бройля к радиусу Дебая – $\eta = \left(\frac{\lambda_{дБ}}{r_D}\right)^2$, для легких ионов намного меньше, чем для электронов, а, значит, сечение упругого рассеяния ионов имеет более резкий

максимум при малых углах рассеяния, что и позволяет использовать малоугловое приближение в задачах рассеяния атомных частиц.

Применение малоуглового приближения приводит к линеаризации уравнения (2.10), и, следовательно, к переходу от уравнения типа Рикатти к уравнению типа Ляпунова:

$$\begin{aligned} \left(\frac{1}{\mu_0} + \frac{1}{\mu}\right) \left(1 + \frac{\partial}{\partial \tau}\right) R(\tau, \mu_0, \mu, \varphi_0, \varphi) = x_{el}(\mu_0, \mu, \varphi_0, \varphi) \delta(\tau) + \\ \int_0^{2\pi} d\varphi' \int_{-1}^0 R(\tau, \mu_0, \mu', \varphi_0, \varphi') x_{el}(\mu', \mu, \varphi', \varphi) \frac{d\mu'}{\mu'} + \\ \int_0^{2\pi} d\varphi' \int_0^1 x_{el}(\mu_0, \mu', \varphi_0, \varphi') R(\tau, \mu', \mu, \varphi', \varphi) \frac{d\mu'}{\mu'}. \end{aligned} \quad (2.12)$$

Сделаем следующие преобразования:

$$\begin{aligned} \int_0^{2\pi} d\varphi' \int_0^1 x_{el}(\mu_0, \mu', \varphi_0, \varphi') R(\tau, \mu', \mu, \varphi', \varphi) \frac{d\mu'}{\mu'} = \\ \frac{1}{\mu_0} \int_0^{2\pi} d\varphi' \int_0^1 x_{el}(\mu_0, \mu', \varphi_0, \varphi') R(\tau, \mu', \mu, \varphi', \varphi) d\mu', \end{aligned} \quad (2.13)$$

т.к. $x_{el}(\mu_0, \mu', \varphi_0, \varphi')$ имеет резкий максимум при $\mu' = \mu_0$;

$$\begin{aligned} \int_0^{2\pi} d\varphi' \int_{-1}^0 R(\tau, \mu_0, \mu', \varphi_0, \varphi') x_{el}(\mu', \mu, \varphi', \varphi) \frac{d\mu'}{\mu'} = \\ \frac{1}{\mu} \int_0^{2\pi} d\varphi' \int_{-1}^0 R(\tau, \mu_0, \mu', \varphi_0, \varphi') x_{el}(\mu', \mu, \varphi', \varphi) d\mu', \end{aligned} \quad (2.14)$$

т.к. $x_{el}(\mu', \mu, \varphi', \varphi)$ имеет резкий максимум при $\mu' = \mu$.

Согласно равенствам (2.13) и (2.14) уравнение (2.12) преобразуется в следующий вид:

$$\begin{aligned} \left(\frac{1}{\mu_0} + \frac{1}{\mu}\right) \left(1 + \frac{\partial}{\partial \tau}\right) R(\tau, \mu_0, \mu, \varphi_0, \varphi) = x_{el}(\mu_0, \mu, \varphi_0, \varphi) \delta(\tau) + \\ \left(\frac{1}{\mu_0} + \frac{1}{\mu}\right) \int_0^{2\pi} d\varphi' \int_{-1}^0 R(\tau, \mu_0, \mu', \varphi_0, \varphi') x_{el}(\mu', \mu, \varphi', \varphi) d\mu'. \end{aligned} \quad (2.15)$$

Выполним прямое преобразование Лапласа уравнения (2.15):

$$\begin{aligned} \int_0^\infty e^{-p\tau} \left[\left(\frac{1}{\mu_0} + \frac{1}{\mu}\right) \left(1 + \frac{\partial}{\partial \tau}\right) R(\tau, \mu_0, \mu, \varphi_0, \varphi) = x_{el}(\mu_0, \mu, \varphi_0, \varphi) \delta(\tau) + \right. \\ \left. \left(\frac{1}{\mu_0} + \frac{1}{\mu}\right) \int_0^{2\pi} d\varphi' \int_{-1}^0 R(\tau, \mu_0, \mu', \varphi_0, \varphi') x_{el}(\mu', \mu, \varphi', \varphi) d\mu' \right] d\tau, \end{aligned} \quad (2.16)$$

$$\left(\frac{1}{\mu_0} + \frac{1}{\mu}\right) (1+p)R(p, \mu_0, \mu, \varphi_0, \varphi) = x_{el}(\mu_0, \mu, \varphi_0, \varphi) + \left(\frac{1}{\mu_0} + \frac{1}{\mu}\right) \int_0^{2\pi} d\varphi' \int_{-1}^0 R(p, \mu_0, \mu', \varphi_0, \varphi') x_{el}(\mu', \mu, \varphi', \varphi) d\mu'. \quad (2.17)$$

Уравнение (2.17) будем решать методом итераций. Первое приближение, получаемое при отбрасывании интегрального слагаемого правой части уравнения (2.17), называемое приближением однократного отклонения, имеет вид:

$$R^1(p, \mu_0, \mu, \varphi_0, \varphi) = \frac{\mu_0|\mu|}{\mu_0+|\mu|} \frac{1}{1+p} x_{el}(\mu_0, \mu, \varphi_0, \varphi). \quad (2.18)$$

Подставив $R^1(p, \mu_0, \mu, \varphi_0, \varphi)$ в интегральное слагаемое правой части уравнения (2.17), получим решение для функции отражения во втором приближении:

$$R^2(p, \mu_0, \mu, \varphi_0, \varphi) = \frac{\mu_0|\mu|}{\mu_0+|\mu|} \left[\frac{1}{1+p} x_{el}(\mu_0, \mu, \varphi_0, \varphi) + \frac{1}{(1+p)^2} \int_0^{2\pi} d\varphi' \int_{-1}^0 x_{el}(\mu_0, \mu', \varphi_0, \varphi') x_{el}(\mu', \mu, \varphi', \varphi) d\mu' \right]. \quad (2.19)$$

Введем обозначение:

$$\int_0^{2\pi} d\varphi' \int_{-1}^0 x_{el}(\mu_0, \mu', \varphi_0, \varphi') x_{el}(\mu', \mu, \varphi', \varphi) d\mu' = x_{el}^2(\mu_0, \mu, \varphi_0, \varphi). \quad (2.20)$$

Продолжив итерационную процедуру, в k -ом приближении получим:

$$R^k(p, \mu_0, \mu, \varphi_0, \varphi) = \frac{\mu_0|\mu|}{\mu_0+|\mu|} \left[\frac{1}{1+p} x_{el}(\mu_0, \mu, \varphi_0, \varphi) + \frac{1}{(1+p)^2} x_{el}^2(\mu_0, \mu, \varphi_0, \varphi) + \dots + \frac{1}{(1+p)^k} \int_0^{2\pi} d\varphi' \int_{-1}^0 x_{el}^{k-1}(\mu_0, \mu', \varphi_0, \varphi') x_{el}(\mu', \mu, \varphi', \varphi) d\mu' \right]. \quad (2.21)$$

Дальнейшее решение основано на применении метода сферических гармоник. Представим функции $x_{el}(\mu_0, \mu, \varphi_0, \varphi)$, $R(p, \mu_0, \mu, \varphi_0, \varphi)$ в виде разложения в ряд по сферическим функциям:

$$x_{el}(\mu_0, \mu, \varphi_0, \varphi) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l x_{lm} Y_{lm}(\mu_0, \varphi_0) Y_{lm}^*(\mu, \varphi), \quad (2.22)$$

$$R(p, \mu_0, \mu, \varphi_0, \varphi) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l R_{lm}(p) Y_{lm}(\mu_0, \varphi_0) Y_{lm}^*(\mu, \varphi), \quad (2.23)$$

где R_{lm} и x_{lm} – коэффициенты разложения функции отражения и индикатрисы упругого рассеяния в ряд по сферическим функциям.

Для применения этого метода необходимо сделать аналитическое продолжение интегралов правой части уравнения (2.21) в область $[0;1]$, таким образом, расширив область интегрирования до $[-1;1]$. Т.к.:

$$\int_0^{2\pi} d\varphi' \int_{-1}^0 x_{el}(\mu_0, \mu', \varphi_0, \varphi') x_{el}(\mu', \mu, \varphi', \varphi) d\mu' = \int_0^{2\pi} d\varphi' \int_0^1 x_{el}(\mu_0, \mu', \varphi_0, \varphi') x_{el}(\mu', \mu, \varphi', \varphi) d\mu', \quad (2.24)$$

то:

$$x_{el}^2(\mu_0, \mu, \varphi_0, \varphi) = \frac{1}{2} \int_0^{2\pi} d\varphi' \int_{-1}^1 x_{el}(\mu_0, \mu', \varphi_0, \varphi') x_{el}(\mu', \mu, \varphi', \varphi) d\mu'. \quad (2.25)$$

Аналогично:

$$x_{el}^3(\mu_0, \mu, \varphi_0, \varphi) = \frac{1}{3} \int_0^{2\pi} d\varphi' \int_{-1}^1 x_{el}^2(\mu_0, \mu', \varphi_0, \varphi') x_{el}(\mu', \mu, \varphi', \varphi) d\mu', \quad (2.26)$$

$$x_{el}^k(\mu_0, \mu, \varphi_0, \varphi) = \frac{1}{k} \int_0^{2\pi} d\varphi' \int_{-1}^1 x_{el}^{k-1}(\mu_0, \mu', \varphi_0, \varphi') x_{el}(\mu', \mu, \varphi', \varphi) d\mu'. \quad (2.27)$$

Подставив уравнения (2.25), (2.26), (2.27) в уравнение (2.21) и представив функции $x_{el}(\mu_0, \mu, \varphi_0, \varphi)$, $R(p, \mu_0, \mu, \varphi_0, \varphi)$ в виде (2.22) и (2.23), получим:

$$R^k(p, \mu_0, \mu, \varphi_0, \varphi) = \frac{\mu_0|\mu|}{\mu_0+|\mu|} \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l Y_{lm}(\mu_0, \varphi_0) Y_{lm}^*(\mu, \varphi) \left[\frac{1}{1+p} x_{lm}(\mu_0, \mu, \varphi_0, \varphi) + \frac{1}{2} \frac{1}{(1+p)^2} x_{lm}^2(\mu_0, \mu, \varphi_0, \varphi) + \dots + \frac{1}{k} \frac{1}{(1+p)^k} x_{lm}^k \right]. \quad (2.28)$$

В случае азимутально-симметричного рассеяния, т.е. когда функция $R(p, \mu_0, \mu, \varphi_0, \varphi)$ не зависит от азимутальных углов φ_0, φ , выполняется теорема сложения:

$$\sum_{m=-l}^l Y_{lm}(\mu_0, \varphi_0) Y_{lm}^*(\mu, \varphi) = P_l(\mu_0\mu + \sqrt{1-\mu_0^2}\sqrt{1-\mu^2}), \quad (2.29)$$

где $P_l(\mu_0\mu + \sqrt{1-\mu_0^2}\sqrt{1-\mu^2})$ – полиномы Лежандра.

С учетом равенства (2.29) в случае азимутально-симметричного рассеяния получим:

$$R^k(p, \mu_0, \mu) = \frac{\mu_0|\mu|}{\mu_0+|\mu|} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{2} P_l(\mu_0\mu + \sqrt{1-\mu_0^2}\sqrt{1-\mu^2}) \left[\frac{1}{1+p} x_l + \frac{1}{2} \frac{1}{(1+p)^2} x_l^2 + \dots + \frac{1}{k} \frac{1}{(1+p)^k} x_l^k \right]. \quad (2.30)$$

Сделаем обратное преобразование Лапласа уравнения (2.30):

$$R(\tau, \mu_0, \mu) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\gamma-i\infty}^{\gamma+i\infty} e^{p\tau} \cdot R(p, \mu_0, \mu) dp. \quad (2.31)$$

Таким образом, решение для функции отражения выглядит следующим образом:

$$R(\tau, \mu_0, \mu) = \frac{\mu_0|\mu|}{\mu_0+|\mu|} \frac{1}{\tau} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{2} P_l(\mu_0\mu + \sqrt{1-\mu_0^2}\sqrt{1-\mu^2}) \left[e^{-(1-x_l)\tau} - e^{-\tau} \right]. \quad (2.32)$$

Функция $R(\tau, \mu_0, \mu)$ описывает распределение отраженных электронов и легких ионов по длине пробега в мишени.

В задачах рассеяния электронов решение (2.32) многократно апробировано на основе сравнения с результатами численного решения уравнения (2.10) [103–105]. Решение (2.32) с высокой точностью количественно описывает распределение электронов по длине пробега в ситуациях, когда сечение упругого рассеяния электронов вследствие эффекта Рамзауэра-Таунсена имеет сложное немонотонное поведение [106].

Более подробно рассмотрим применимость решения (2.32) для задач рассеяния легких ионов. Рассмотрим существующие в настоящий момент в литературе решения задачи упругого рассеяния легких ионов. Все рассуждения будем строить для изначально азимутально-симметричной ситуации рассеяния.

Сделаем обратное преобразование Лапласа уравнения (2.18) и получим решение в приближении однократного отклонения или в приближении прямолинейных траекторий:

$$R(\tau, \mu_0, \mu) = \frac{\mu_0|\mu|}{\mu_0+|\mu|} x_{el}(\mu_0, \mu). \quad (2.33)$$

Найдем решение для функции отражения частиц $R(\tau, \mu_0, \mu)$ в так называемом диффузионном приближении. Для этого в уравнении (2.15)

разложим подынтегральную функцию $R(\tau, \mu_0, \mu')$ в ряд Тейлора вблизи $\mu' = \mu$ и ограничимся тремя членами разложения:

$$R(\tau, \mu_0, \mu') \approx R(\tau, \mu_0, \mu) + \left[\frac{\partial R}{\partial \mu} \right] (\mu - \mu') + \frac{1}{2} \left[\frac{\partial^2 R}{\partial \mu^2} \right] (\mu - \mu')^2. \quad (2.34)$$

Подставив разложение (2.34) в уравнение (2.15), получим следующее:

$$\frac{\partial}{\partial \tau} R(\tau, \mu_0, \mu) = \frac{\mu_0 |\mu|}{\mu_0 + |\mu|} x_{el}(\mu_0, \mu) + \frac{\sigma_{tr}}{2} \Delta_\mu R(\tau, \mu_0, \mu), \quad (2.35)$$

где $\Delta_\mu = \frac{\partial}{\partial \mu} (1 - \mu^2) \frac{\partial}{\partial \mu}$ – полярная часть оператора Лапласа в сферических координатах; σ_{tr} – транспортное сечение.

Подробный вывод перехода от уравнения (2.15) к уравнению (2.35) представлен в работе [5].

Решение уравнения (2.35) найдем, представив функции $x_{el}(\mu_0, \mu)$ и $R(\tau, \mu_0, \mu)$ в виде разложения в ряд по полиномам Лежандра:

$$x_{el}(\mu_0, \mu) = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{2} P_l(\mu_0 \mu + \sqrt{1 - \mu_0^2} \sqrt{1 - \mu^2}) x_l, \quad (2.36)$$

$$R(\tau, \mu_0, \mu) = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{2} P_l(\mu_0 \mu + \sqrt{1 - \mu_0^2} \sqrt{1 - \mu^2}) R_l(\tau). \quad (2.37)$$

Подставив разложение (2.36) и (2.37) в уравнение (2.35), получим:

$$R(\tau_{tr}, \mu_0, \mu) = \frac{\mu_0 |\mu|}{\mu_0 + |\mu|} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{2} P_l(\mu_0 \mu + \sqrt{1 - \mu_0^2} \sqrt{1 - \mu^2}) \cdot x_l \cdot e^{-\frac{l(l+1)}{2} \tau_{tr}}, \quad (2.38)$$

где $\tau_{tr} = \frac{z}{l_{tr}}$ – пробег частицы, измеренный в длинах транспортного пробега; l_{tr} – транспортная длина.

Решение в рамках приближения прямолинейных траекторий (2.33) и решение в рамках диффузионного приближения (2.38) традиционно используются для описания взаимодействия ионов с твердым телом. Решение (2.32) получено впервые решением граничной задачи для уравнения упругого переноса методом инвариантного погружения в малоугловом приближении. Последовательность получения решения (2.32) для электронов и ионов одинакова. Различие состоит лишь в выборе сечения упругого рассеяния.

Сравним результаты решения на основе уравнений (2.32), (2.33) и (2.38).

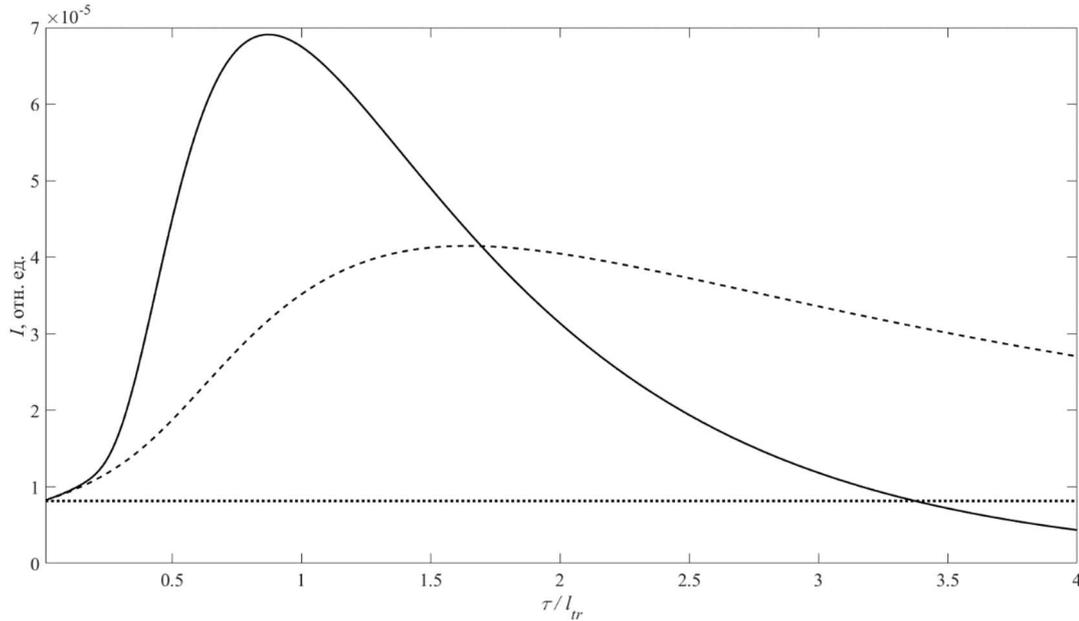


Рисунок 2.2 – Распределение отраженных протонов по длине пробега в титановой мишени. Пробег в мишени выражен в единицах транспортной длины. Начальная энергия протонов $E_0 = 20$ кэВ, нормальное падение, отражение на 135° Сплошная линия – расчет в диффузионном приближении (формула (2.38)), штриховая линия – расчет по методике, развитой в настоящей работе (формула (2.32)), пунктирная линия – расчет в приближении прямолинейных траекторий (формула (2.33))

Рис. 2.2 демонстрирует важные особенности поведения распределения отраженных ионов по длине пробега в мишени. Графики в нулевой точке по оси абсцисс на рис. 2.2 отличны от нуля по оси ординат. При нулевых пробегах ионов в мишени регистрируются ионы, отраженные от самой поверхности мишени, то есть те ионы, пробег которых в мишени равен нулю. Такая ситуация характерна при описании ионного рассеяния по всем трем методикам, что удовлетворяет действительности. Однако, с ростом пробега решение в приближении прямолинейных траекторий остается константой, что не соответствует действительности, т.к. с ростом пробега увеличивается изотропизация потока,

что увеличивает вероятность рассеяния ионов на больший угол. При определенной длине пробега достигается максимум распределения, что соответствует той длине, на которой поток ионов полностью изотропизован, далее наблюдается спад распределения до нуля.

Для апробации методики, развитой в настоящей работе (уравнение (2.32)), проведено сравнение с данными компьютерного моделирования.

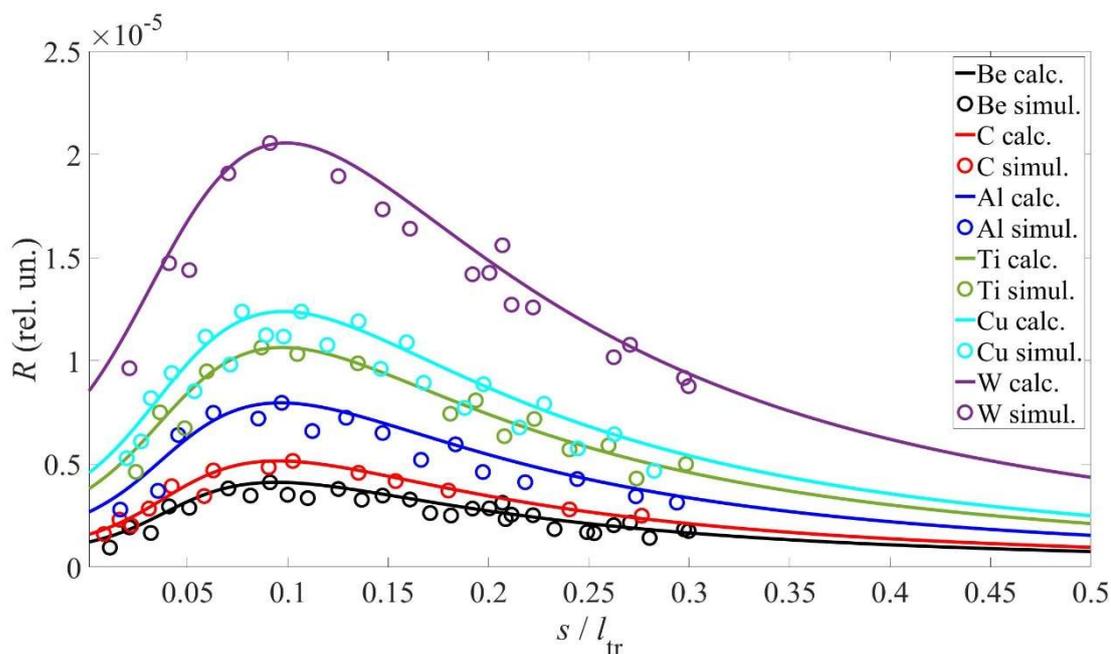


Рисунок 2.3 – Распределение отраженных протонов по длине пробега. Угол падения $\alpha = 80^\circ$, угол отражения 110° , угол рассеяния $\theta = 30^\circ$, начальная энергия протонов $E_0 = 10$ кэВ. Линии – расчет по формуле (2.32), символы – компьютерное моделирование

Рис. 2.3 демонстрирует, что построенная модель с удовлетворительной точностью описывает упругие процессы ионного рассеяния. Рис. 2.3 демонстрирует особенности поведения распределения отраженных протонов по длине пробега. Вертикальный участок при пробегах, равных нулю, определяет плотность потока ионов, отраженных от приповерхностного слоя мишени. Рост количества отраженных ионов с увеличением пробега связан с процессом изотропизации нисходящего потока ионов. Изотропизация нисходящего потока

открывает возможность перехода в восходящее движение за счет рассеяния на меньшие углы, чем углом между направлениями n_0 и n . Т.к. сечение упругого рассеяния ионов имеет резкий максимум при малых углах рассеяния, то процесс рассеяния на малые углы более вероятен. Максимум распределения соответствует величине пробега порядка транспортной длины. Транспортная длина – расстояние, пройдя которое поток ионов становится близким к изотропному.

Стоит отметить, что распределение отраженных ионов по длине пробега представляет собой отношение числа ионов, отраженных в направлении n и прошедших расстояние τ в мишени, к плотности потока ионов, зондирующих мишень в направлении n_0 . Аналитические данные на рис. 2.3 представлены в абсолютных значениях. Результаты моделирования, определяющие лишь форму функции отражения, отнормированы к значениям, полученным из аналитических расчетов.

Из рис. 2.3 следует удовлетворительное соответствие расчетов по разработанной методике данным компьютерного моделирования. Расхождения, наблюдаемые в области малых пробегов, могут быть связаны с незнанием точных данных по сечениям упругого рассеяния ионов в твердом теле.

2.3 Основные результаты и выводы второй главы

Разработана аналитическая теоретическая модель описания процессов отражения электронов и легких ионов от поверхности твердых тел. Теоретическая модель базируется на решении граничной задачи для уравнения упругого переноса, описывающее распределение отраженных частиц по длине пробега, многократно и успешно апробированным в задачах электронного рассеяния. Решение строится методом инвариантного погружения Амбарцумяна в малоугловом приближении. При упругом рассеянии заряженных частиц, процессе, который описывается дифференциальным сечением упругого рассеяния, которое имеет резкий максимум при малых углах рассеяния,

возникает возможность построения малоуглового приближения, резко упрощающего интегро-дифференциальное уравнение типа Рикатти, сводя его к уравнению типа Ляпунова, которое допускает аналитическое решение на основе метода сферических гармоник.

Продемонстрирована применимость построенной аналитической теоретической модели для описания процесса отражения легких ионов. Аналитические результаты расчета распределения отраженных протонов по длине пробега для различных мишеней сравнены с результатами моделирования методом Монте-Карло. Показана несостоятельность методов описания процесса отражения легких ионов на основе традиционно используемых приближения прямолинейных траекторий и диффузионного приближения.

Глава 3. Количественная методика описания характеристических потерь энергии электронов в твердых телах

3.1 Решение граничной задачи для уравнения неупругого переноса электронов. Решение Ландау

Для решения граничной задачи для уравнения неупругого переноса (2.7) его следует дополнить граничными условиями, учитывающими, что моноэнергетический, мононаправленный, широкий поток частиц падает на верхнюю границу:

$$R(0, \Delta) = R_0 \delta(\Delta). \quad (3.1)$$

Запишем уравнение (2.7):

$$\frac{\partial N(\tau, \Delta)}{\partial \tau} = -N(\tau, \Delta) + \int_0^\Delta x_{in}(\varepsilon) N(\tau, \Delta - \varepsilon) d\varepsilon. \quad (3.2)$$

Сделаем прямое преобразование Лапласа уравнения (3.2):

$$\int_0^\infty e^{-p\Delta} \left[\frac{\partial N(\tau, \Delta)}{\partial \tau} = -N(\tau, \Delta) + \int_0^\Delta x_{in}(\varepsilon) N(\tau, \Delta - \varepsilon) d\varepsilon \right] d\Delta. \quad (3.3)$$

Таким образом, получим решение для функции комплексной переменной $N(\tau, p)$:

$$N(\tau, p) = e^{-(1-x_{in}(p))\tau}. \quad (3.4)$$

Сделав обратное преобразование Лапласа, получим решение для функции $N(\tau, \Delta)$:

$$N(\tau, \Delta) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\gamma-i\infty}^{\gamma+i\infty} e^{p\Delta} e^{-(1-x_{in}(p))\tau} dp = \frac{1}{2\pi i} e^{-\tau} \int_{\gamma-i\infty}^{\gamma+i\infty} e^{p\Delta} \cdot e^{x_{in}(p)\tau} dp. \quad (3.5)$$

Разложим функцию $e^{x_{in}(p)\tau}$ в ряд Тейлора:

$$N(\tau, \Delta) = \frac{1}{2\pi i} e^{-\tau} \int_{\gamma-i\infty}^{\gamma+i\infty} e^{p\Delta} \cdot \left(1 + x_{in}(p)\tau + \frac{(x_{in}(p)\tau)^2}{2!} + \dots + \frac{(x_{in}(p)\tau)^k}{k!} + \dots \right) dp. \quad (3.6)$$

Получим окончательный вид решения для функции $N(\tau, \Delta)$, также называемое решением Ландау [107]:

$$N(\tau, \Delta) = e^{-\tau} \left(\delta(\Delta) + \tau x_{in}(\Delta) + \frac{\tau^2}{2!} \int_0^\Delta x_{in}(\Delta - \varepsilon) x_{in}(\varepsilon) d\varepsilon + \dots + \frac{\tau^k}{k!} \int_0^\Delta x_{in}^{k-1}(\Delta - \varepsilon) x_{in}(\varepsilon) d\varepsilon + \dots \right), \quad (3.7)$$

где $\tau = z/l_{in}$ – пробег электрона в мишени, выраженный в длинах свободного неупругого пробега; $x_{in}(\Delta)$ – нормированное дифференциальное сечение неупругого рассеяния электронов или индикатриса неупругого рассеяния; $x_{in}^k(\Delta) = \int_0^\Delta x_{in}^{k-1}(\Delta - \varepsilon) x_{in}(\varepsilon) d\varepsilon$ – вероятность электрона потерять энергию Δ в результате k -неупругих рассеяний.

Решение (3.7) описывает распределение по потерям энергии электронов, прошедших путь τ в мишени.

3.2 Энергетические спектры отраженных электронов

Энергетические спектры отраженных электронов рассчитываются как свертка решения задачи упругого и неупругого рассеяния:

$$R(\Delta, \mu_0, \mu, \varphi_0, \varphi) = \int_0^\infty R\left(\frac{z}{l_{el}}, \mu_0, \mu, \varphi_0, \varphi\right) N\left(\frac{z}{l_{in}}, \Delta\right) dz. \quad (3.8)$$

В качестве функции $R\left(\frac{z}{l_{el}}, \mu_0, \mu, \varphi_0, \varphi\right)$ используем полученное ранее решение (2.32), в качестве функции $N\left(\frac{z}{l_{in}}, \Delta\right)$ используем решение Ландау (3.7):

$$R(\Delta, \mu_0, \mu, \varphi_0, \varphi) = \int_0^\infty \frac{\mu_0 |\mu|}{\mu_0 + |\mu|} \frac{1}{l_{el}} \sum_{l=0}^\infty \frac{2l+1}{2} P_l(\mu_0 \mu + \sqrt{1 - \mu_0^2} \sqrt{1 - \mu^2} \cos(\varphi_0 - \varphi)) \left(e^{-(1-x_l) \frac{z}{l_{el}}} - e^{-\frac{z}{l_{el}}} \right) \cdot e^{-\frac{z}{l_{in}}} \left(\delta(\Delta) + \frac{z}{l_{in}} x_{in}(\Delta) + \frac{\left(\frac{z}{l_{in}}\right)^2}{2!} \int_0^\Delta x_{in}(\Delta - \varepsilon) x_{in}(\varepsilon) d\varepsilon + \dots + \frac{\left(\frac{z}{l_{in}}\right)^k}{k!} \int_0^\Delta x_{in}^{k-1}(\Delta - \varepsilon) x_{in}(\varepsilon) d\varepsilon + \dots \right) dz. \quad (3.9)$$

Выполнив преобразования уравнения (3.9), получим вид энергетических спектров отраженных электронов в представлении парциальных интенсивностей [104]:

$$R(\Delta, \mu_0, \mu, \varphi_0, \varphi) = C_0 \delta(\Delta) + C_1 x_{in}(\Delta) + C_2 x_{in}^2(\Delta) + \dots + C_k x_{in}^k(\Delta) + \dots, \quad (3.10)$$

где C_k – парциальные коэффициенты; $x_{in}^2(\Delta)$ – вероятность потерять энергию Δ в результате двух неупругих соударений; $x_{in}^k(\Delta)$ – вероятность потерять энергию Δ в результате k -неупругих соударений.

Коэффициенты C_k имеют следующий вид:

$$C_0 = -\frac{\mu_0|\mu|}{\mu_0+|\mu|} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{2} P_l \left(\mu_0\mu + \sqrt{1-\mu_0^2} \sqrt{1-\mu^2} \cos(\varphi_0 - \varphi) \right) \ln(1 - \lambda x_l), \quad (3.11)$$

$$C_k = \frac{\mu_0|\mu|}{\mu_0+|\mu|} \frac{(1-\lambda)^k}{k} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{2} P_l \left(\mu_0\mu + \sqrt{1-\mu_0^2} \sqrt{1-\mu^2} \cos(\varphi_0 - \varphi) \right) \left(\frac{1}{(1-\lambda x_l)^k} - 1 \right), \quad (3.12)$$

где C_0 – описывает угловое распределение упруго отраженных электронов; x_l – коэффициенты разложения индикатрисы упругого рассеяния $x_{el}(\mu)$ в ряд по полиномам Лежандра P_l ; $\lambda = \frac{\sigma_{el}}{\sigma_{el} + \sigma_{in}}$ – вероятность или альbedo однократного упругого рассеяния.

Ключевым параметром решения, полученного в рамках метода парциальных интенсивностей, является нормированное дифференциальное сечение неупругого рассеяния электронов $x_{in}(\Delta)$. Существуют ограниченные базы данных сечений, восстановленных из экспериментальных данных рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии и спектроскопии характеристических потерь энергии электронов [108,109]. Однако, проблема определения $x_{in}(\Delta)$ к настоящему моменту полностью не решена.

3.3 Модель отражения от слоисто-неоднородных мишеней

Аналитическая модель отражения от слоисто-неоднородных мишеней строится согласно следующим рассуждениям.

Рассмотрим двухслойную мишень, схема которой представлена на рис. 3.1:

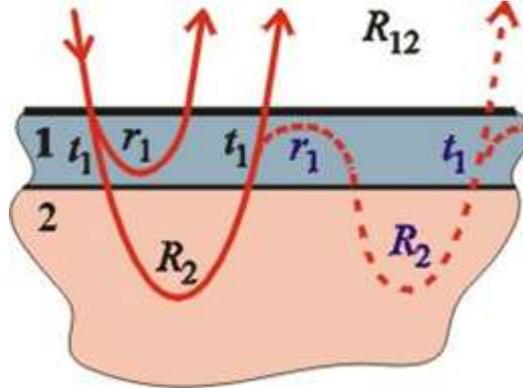


Рисунок 3.1 – Процессы, приводящие к изменению функции отражения $R(\theta_0, \theta, \varphi_0 - \varphi)$: функция t_1 – функция пропускания для слоя материала «1», функция r_1 – функция отражения от слоя материала «1», функция R_2 – функция отражения от материала «2», функция R_{12} – функция отражения от материала «1» и «2»

Функция пропускания представляет собой оператор, определяющий плотность потока частиц $I(E, \theta_0, \theta, \varphi_0 - \varphi)$, прошедших сквозь слой толщиной d :

$$I_T(E, \theta, \varphi) = \int_0^{2\pi} d\varphi' \int_0^\pi T(d, \theta_0, E - E', \theta - \theta', \varphi - \varphi') I_0(E', \theta', \varphi') d\theta' = T \otimes I_0. \quad (3.13)$$

Функция отражения представляет собой оператор, определяющий плотность потока частиц $I(E, \theta_0, \theta, \varphi_0 - \varphi)$, отраженных от слоя толщиной d :

$$I_r(E, \theta, \varphi) = \int_0^{2\pi} d\varphi' \int_0^\pi r(d, \theta_0, E - E', \theta - \theta', \varphi - \varphi') I_0(E', \theta', \varphi') d\theta' = r \otimes I_0. \quad (3.14)$$

В формулах (3.13) и (3.14) дана как подробная, так и матричная запись действия функции пропускания и функции отражения на плотность потока

падающих частиц $I_0(E', \theta', \varphi')$. Плотность потока частиц, отраженных и прошедших сквозь слой, есть сумма плотностей потока частиц $I_T(E, \theta, \varphi)$ и $I_r(E, \theta, \varphi)$ и обозначается $I_{T,r}(E, \theta, \varphi)$.

Воспользовавшись матричной записью, запишем плотность потока частиц, прошедших и отразившихся от слоя материала «1», толщиной d_1 , и отразившихся от материала «2», $R_{12}(E, \theta_0, \theta, \varphi_0 - \varphi)$:

$$R_{12} = r_1 + t_1 \otimes R_2 \otimes t_1 + t_1 \otimes R_2 \otimes r_1 \otimes R_2 \otimes t_1 + \dots \quad (3.15)$$

В первом приближении пренебрежем последними слагаемыми в формуле (3.15):

$$R_{12} = r_1 + t_1 \otimes R_2 \otimes t_1, \quad (3.16)$$

где $t(d, \theta_0, E - E') = t\left(\frac{d}{\cos \theta_0}\right) \frac{1}{\sqrt{2\pi\bar{\varepsilon}^2 d / \cos \theta_0}} e^{-\left(\frac{(E-E'-\bar{\varepsilon}d/\cos \theta_0)}{2\bar{\varepsilon}^2 d / \cos \theta_0}\right)^2}$ – функция

пропускания, которая описывается нормальным законом распределения.

Если известны экспериментальные данные по спектрам $R_1(E, \theta_0, \theta, \varphi_0 - \varphi)$ и $R_2(E, \theta_0, \theta, \varphi_0 - \varphi)$, то можно получить более простую формулу для определения $R_{12}(E, \theta_0, \theta, \varphi_0 - \varphi)$. Будем использовать представление (3.16) для записи функции отражения от однородной полубесконечной мишени из материала «1»:

$$R_1 = r_1 + t_1 \otimes R_1 \otimes t_1. \quad (3.17)$$

Получив выражение для функции r_1 из формулы (3.17) и подставив ее в формулу (3.16), получим:

$$R_{12} = R_1 + t_1 \otimes (R_2 - R_1) \otimes t_1. \quad (3.18)$$

Формулу (3.18) можно легко обобщить на трехслойную мишень. Покроем мишень, представленную на рис. 3.1, сверху слоем, толщиной d_0 из материала «0», тогда получим:

$$R_{012} = r_0 + t_0 \otimes R_{12} \otimes t_0. \quad (3.19)$$

Аналогично формуле (3.17), получаем:

$$R_0 = r_0 + t_0 \otimes R_0 \otimes t_0. \quad (3.20)$$

Для трехслойной модели получаем итоговую формулу:

$$R_{012} = R_0 + t_0 \otimes (R_{12} - R_0) \otimes t_0. \quad (3.21)$$

3.4 Угловые распределения отраженных электронов

Запишем уравнение (2.17):

$$\begin{aligned} \left(\frac{1}{\mu_0} + \frac{1}{\mu}\right) (1+p)R(p, \mu_0, \mu, \varphi_0, \varphi) &= x_{el}(\mu_0, \mu, \varphi_0, \varphi) + \left(\frac{1}{\mu_0} + \right. \\ &+ \left.\frac{1}{\mu}\right) \int_0^{2\pi} d\varphi' \int_{-1}^0 R(p, \mu_0, \mu', \varphi_0, \varphi') x_{el}(\mu', \mu, \varphi', \varphi) d\mu'. \end{aligned} \quad (3.22)$$

Уравнение (3.22) решим методом итераций. В результате получим:

$$\begin{aligned} R(p, \mu_0, \mu, \varphi_0, \varphi) &= \frac{\mu_0|\mu|}{\mu_0+|\mu|} \frac{1}{(1+p)} x_{el}(\mu_0, \mu, \varphi_0, \varphi) + \\ + \frac{\mu_0|\mu|}{\mu_0+|\mu|} \int_0^{2\pi} d\varphi' \sum_{k=2}^{\infty} \frac{1}{(1+p)^k} \int_{-1}^0 x_{el}^{k-1}(\mu_0, \mu', \varphi_0, \varphi') x_{el}(\mu', \mu, \varphi', \varphi) d\mu'. \end{aligned} \quad (3.23)$$

Выполнив обратное преобразование Лапласа, получим:

$$\begin{aligned} R(\tau, \mu_0, \mu, \varphi_0, \varphi) &= \\ \frac{\mu_0|\mu|}{\mu_0+|\mu|} e^{-\tau} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\tau^{k-1}}{(k-1)!} \int_{-1}^0 x_{el}^{k-1}(\mu_0, \mu', \varphi_0, \varphi') x_{el}(\mu', \mu, \varphi', \varphi) d\mu', \end{aligned} \quad (3.24)$$

где $\tau = \frac{z}{l_{el}}$.

Выполнив процедуру аналитического продолжения, получим:

$$\begin{aligned} R(\tau, \mu_0, \mu, \varphi_0, \varphi) &= \\ \frac{\mu_0|\mu|}{\mu_0+|\mu|} e^{-\tau} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\tau^{k-1}}{k(k-1)!} \int_{-1}^1 x_{el}^{k-1}(\mu_0, \mu', \varphi_0, \varphi') x_{el}(\mu', \mu, \varphi', \varphi) d\mu'. \end{aligned} \quad (3.25)$$

Применив метод сферических гармоник, получим:

$$\begin{aligned} R(\tau, \mu_0, \mu, \varphi_0, \varphi) &= \frac{\mu_0|\mu|}{\mu_0+|\mu|} e^{-\tau} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\tau^{k-1}}{k(k-1)!} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{2} P_l\left(\mu_0\mu + \right. \\ &\left. \sqrt{1-\mu_0^2} \sqrt{1-\mu^2} \cos(\varphi_0 - \varphi)\right) (x^l)^k. \end{aligned} \quad (3.26)$$

Угловые распределения отраженных электронов получим в результате свертки решения (3.26) с решением Ландау:

$$N(\tau, \Delta) = e^{-\tau} \left(\delta(\Delta) + \tau x_{in}(\Delta) + \frac{\tau^2}{2!} \int_0^\Delta x_{in}(\Delta - \varepsilon) x_{in}(\varepsilon) d\varepsilon + \dots + \right. \\ \left. \frac{\tau^k}{k!} \int_0^\Delta x_{in}^{k-1}(\Delta - \varepsilon) x_{in}(\varepsilon) d\varepsilon + \dots \right), \quad (3.27)$$

где $\tau = \frac{z}{l_{in}}$.

Угловое распределение упруго отраженных электронов можно найти путем свертки решения (3.26) с первым слагаемым решения Ландау (3.27), описывающим электроны, прошедших путь τ без неупругих потерь энергии:

$$R(\mu_0, \mu, \varphi_0, \varphi) = \frac{\mu_0 |\mu|}{\mu_0 + |\mu|} \int_0^\infty \left[e^{-\frac{z}{l_{el}} \sum_{l=0}^\infty \frac{2l+1}{2} P_l(\mu_0 \mu + \right. \\ \left. \sqrt{1 - \mu_0^2} \sqrt{1 - \mu^2} \cos(\varphi_0 - \varphi)) (x^l)^k \sum_{k=1}^\infty \frac{\left(\frac{z}{l_{el}}\right)^{k-1}}{k(k-1)!} \right] \cdot e^{-\frac{z}{l_{in}} dz}. \quad (3.28)$$

В результате получим решение:

$$R(\mu_0, \mu, \varphi_0, \varphi) = -\frac{\mu_0 |\mu|}{\mu_0 + |\mu|} \sum_{l=0}^\infty \frac{2l+1}{2} P_l \left(\mu_0 \mu + \sqrt{1 - \mu_0^2} \sqrt{1 - \mu^2} \cos(\varphi_0 - \right. \\ \left. \varphi) \right) \ln(1 - \lambda x_l). \quad (3.29)$$

где $\lambda = \frac{\sigma_{el}}{\sigma_{el} + \sigma_{in}}$ – альбеда однократного упругого рассеяния.

Аналогично определяется угловое распределение электронов разной кратности неупругого рассеяния. Распределение отраженных электронов по длине пробега сворачивается с суммой слагаемых в решении Ландау, соответствующей необходимой кратности потерь энергии. В результате получим решение:

$$R^k(\mu_0, \mu, \varphi_0, \varphi) = \frac{\mu_0 |\mu|}{\mu_0 + |\mu|} \sum_{l=0}^\infty \frac{2l+1}{2} P_l \left(\mu_0 \mu + \sqrt{1 - \mu_0^2} \sqrt{1 - \mu^2} \cos(\varphi_0 - \right. \\ \left. \varphi) \right) \frac{(1-\lambda)^k}{k} \left[\frac{1}{(1-\lambda x_l)^k} - 1 \right]. \quad (3.30)$$

Решение (3.29) применительно для электронного рассеяния подробно апробировано в работах [103–105]. В работе [104] показано удовлетворительное соответствие результатов, полученных по уравнению (3.29), результатам

точного численного решения уравнения (2.10). Недостатком решения (3.29) является его неаддитивность по компонентам многокомпонентной мишени. Угловые распределения электронов, упруго отраженных от отдельных компонент многокомпонентной мишени, определяются согласно следующей формуле:

$$R_j(\mu_0, \mu, \varphi_0, \varphi) = \frac{\mu_0|\mu|}{\mu_0+|\mu|} \beta_j \lambda \alpha \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l Y_{lm}(\mu_0, \varphi_0) Y_{lm}^*(\mu, \varphi) \frac{x_{jlm}^{[\lambda+\alpha(1-\lambda)]-x_{lm}\lambda}}{[(1-x_{lm})\lambda+\alpha(1-\lambda)][\lambda+\alpha(1-\lambda)]}. \quad (3.31)$$

В случае азимутально-симметричного рассеяния решение (3.31) преобразуется в вид:

$$R_j(\mu_0, \mu) = \frac{\mu_0|\mu|}{\mu_0+|\mu|} \beta_j \lambda \alpha \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{2} P_l(\mu_0\mu + \sqrt{1-\mu_0^2}\sqrt{1-\mu^2}) \frac{x_j^{l[\lambda+\alpha(1-\lambda)]-x^l\lambda}}{[(1-x^l)\lambda+\alpha(1-\lambda)][\lambda+\alpha(1-\lambda)]}, \quad (3.32)$$

где $R_j(\mu_0, \mu)$ – функция отражения от отдельной компоненты многокомпонентной мишени; $\beta_j = \frac{n_j \sigma_{elj}}{\sum_k (n_k \sigma_{elk})}$, причем $\sum_j \beta_j = 1$; n_j – концентрация j -ой компоненты в мишени; σ_{elj} – сечение упругого рассеяния на j -ой компоненте мишени; x_j^l – индикатриса упругого рассеяния для j -ой компоненты мишени; α – подгоночный параметр.

3.5 Аналитическая методика описания сигнала спектроскопии пиков упруго отраженных электронов

3.5.1 Апробация развитого метода расчета угловых распределений упруго отраженных электронов на основе сравнения с результатами моделирования методом дискретных ординат

Апробация разработанной аналитической методики описания отражения электронов от однокомпонентных мишеней выполнена на основе сравнения аналитических расчетов с результатами моделирования методом дискретных ординат [110]. Расчеты выполнены на основе формулы (3.29) для бериллиевой,

углеродной, медной, вольфрамовой и золотой мишени для энергии зондирующего пучка электронов 5 и 40 кэВ и для двух геометрий рассеяния – нормального падения электронов на мишень и скользящего падения под углом 75°. Рис. (3.2–3.6) демонстрируют отличное совпадение результатов сравнения.

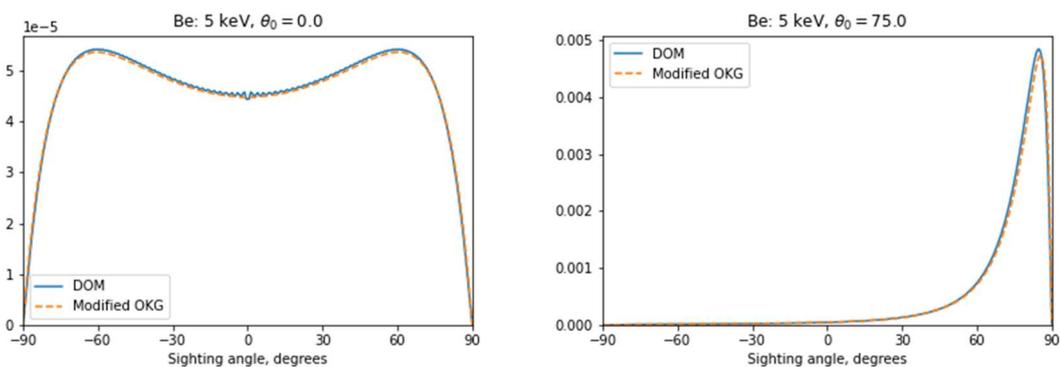


Рисунок 3.2 – Угловые распределения электронов, упруго отраженных от бериллия

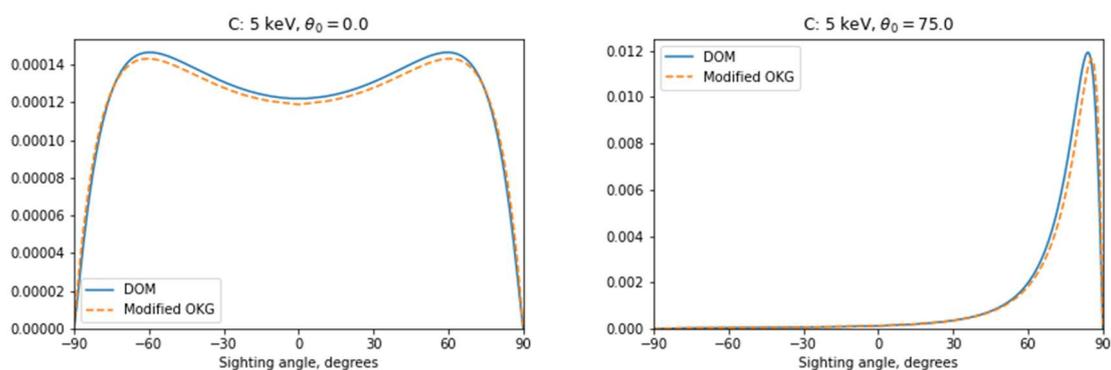


Рисунок 3.3 – Угловые распределения электронов, упруго отраженных от углерода

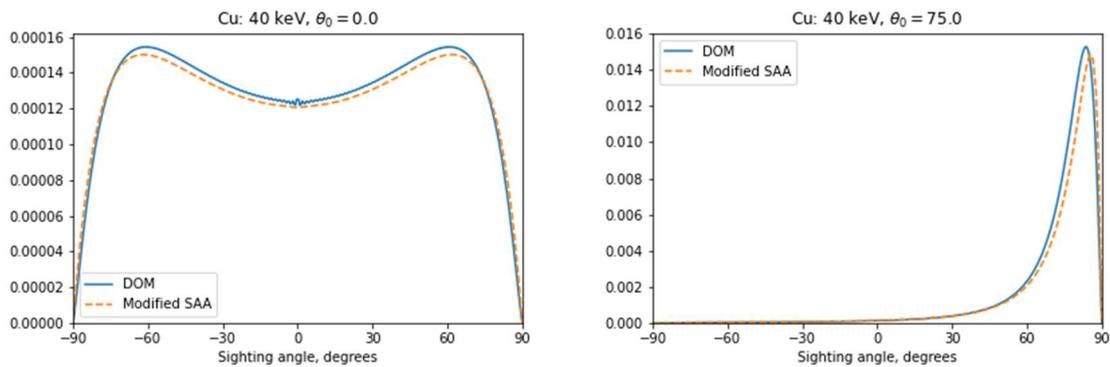


Рисунок 3.4 – Угловые распределения электронов, упруго отраженных от меди

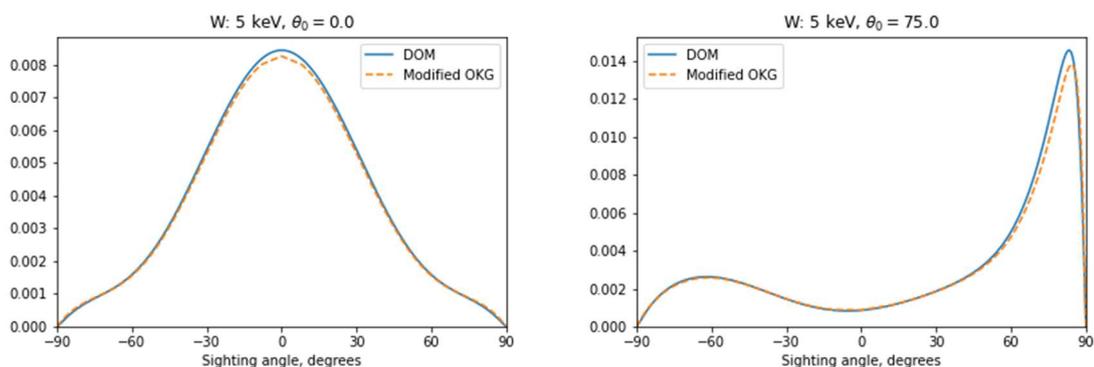


Рисунок 3.5 – Угловые распределения электронов, упруго отраженных от вольфрама

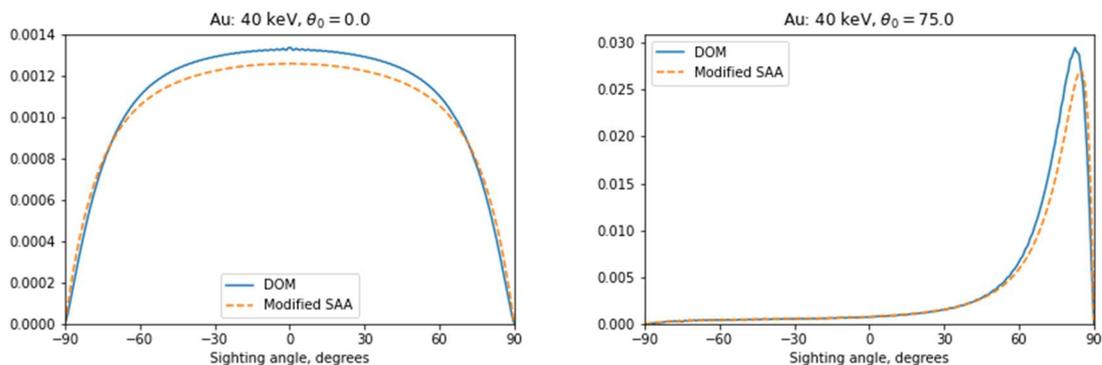


Рисунок 3.6 – Угловые распределения электронов, упруго отраженных от золота

Апробация разработанной аналитической методики описания отражения электронов от многокомпонентных мишеней выполнена на основе сравнения

аналитических расчетов с результатами моделирования методом дискретных ординат. Расчеты выполнены на основе формулы (3.31) для соединений – BeO, CH₂, LiF, HfO₂, WC для энергии зондирующего пучка электронов 2, 5 и 40 кэВ и для двух геометрий рассеяния – нормального падения электронов на мишень и скользящего падения под углом 75°. Рис. (3.7–3.12) демонстрируют отличное совпадение результатов сравнения. Стоит отметить неудовлетворительность описания угловых распределений электронов, упруго отраженных от многокомпонентных соединений, с помощью приближения прямолинейных траекторий.

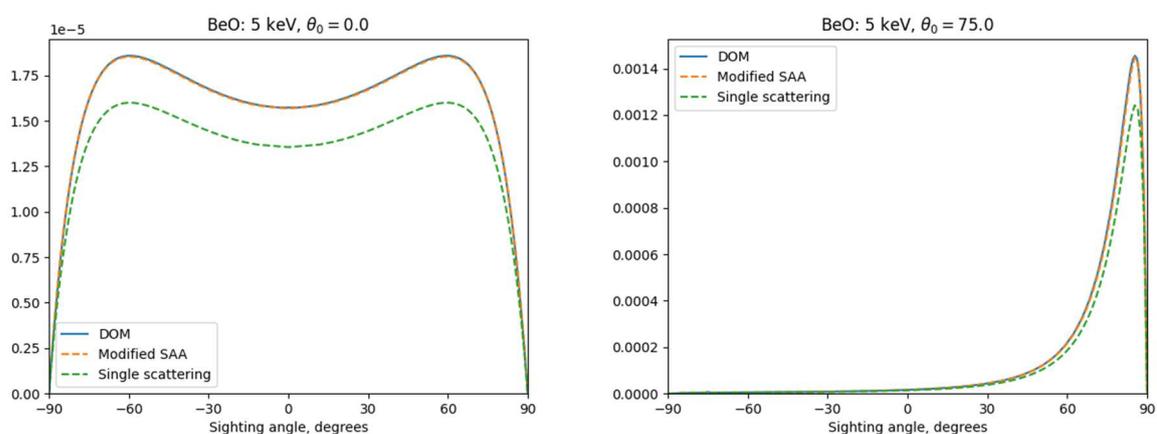


Рисунок 3.7 – Угловые распределения электронов, упруго отраженных от BeO

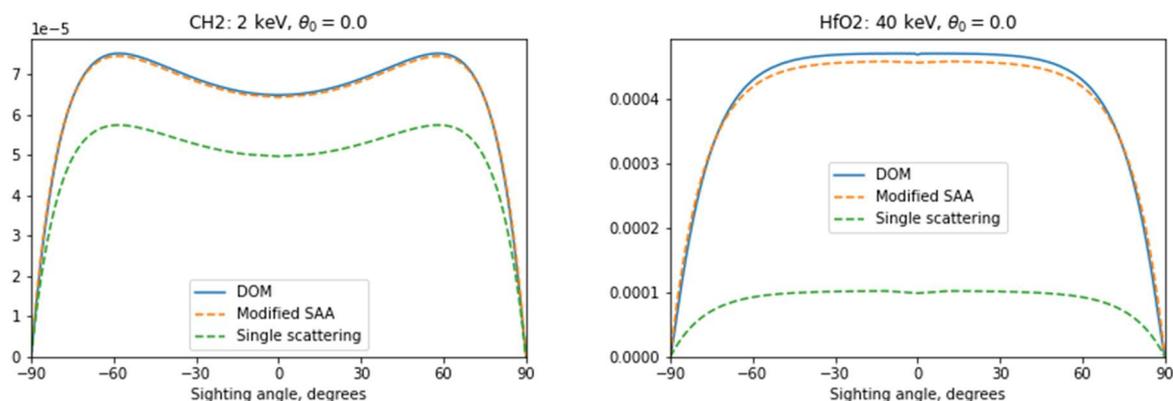


Рисунок 3.8 – Угловые распределения электронов, упруго отраженных от CH₂ и HfO₂

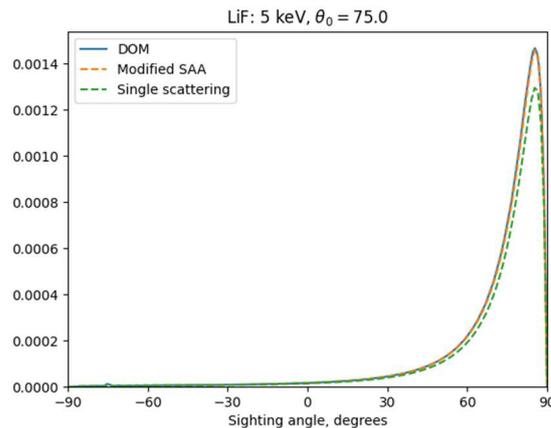
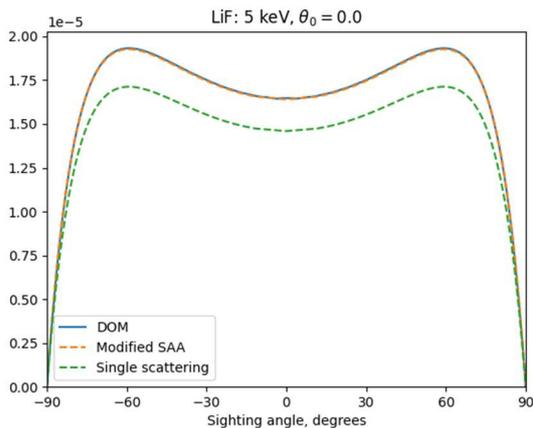


Рисунок 3.9 – Угловые распределения электронов, упруго отраженных от LiF

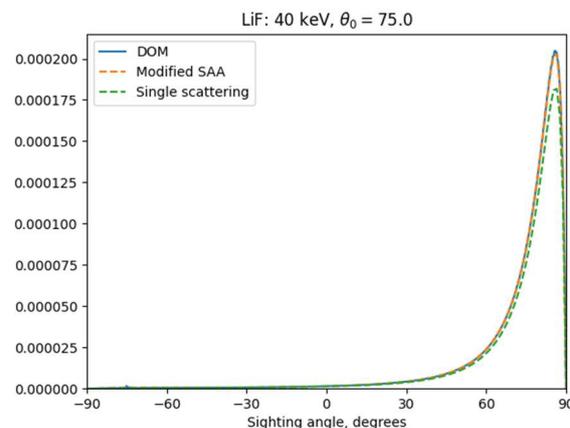
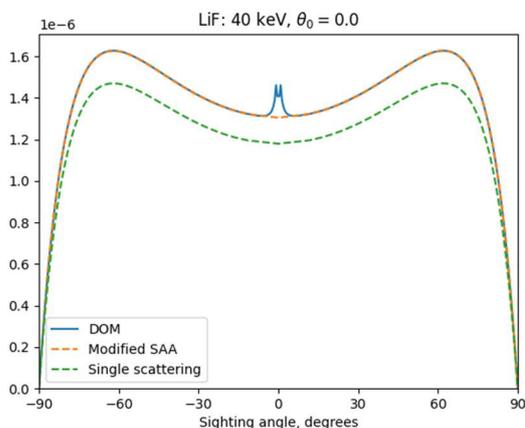


Рисунок 3.10 – Угловые распределения электронов, упруго отраженных от LiF

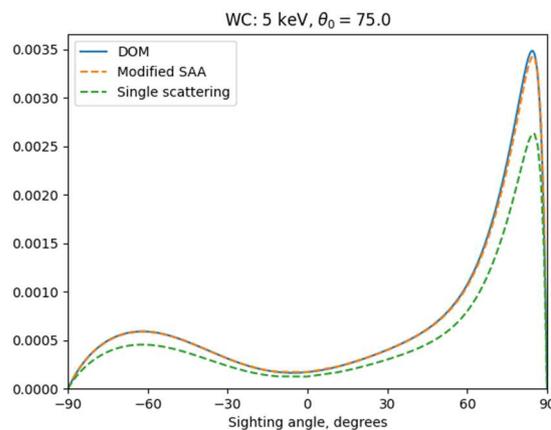
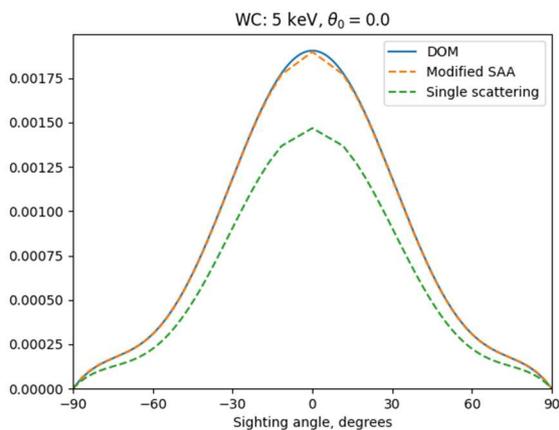


Рисунок 3.11 – Угловые распределения электронов, упруго отраженных от WC

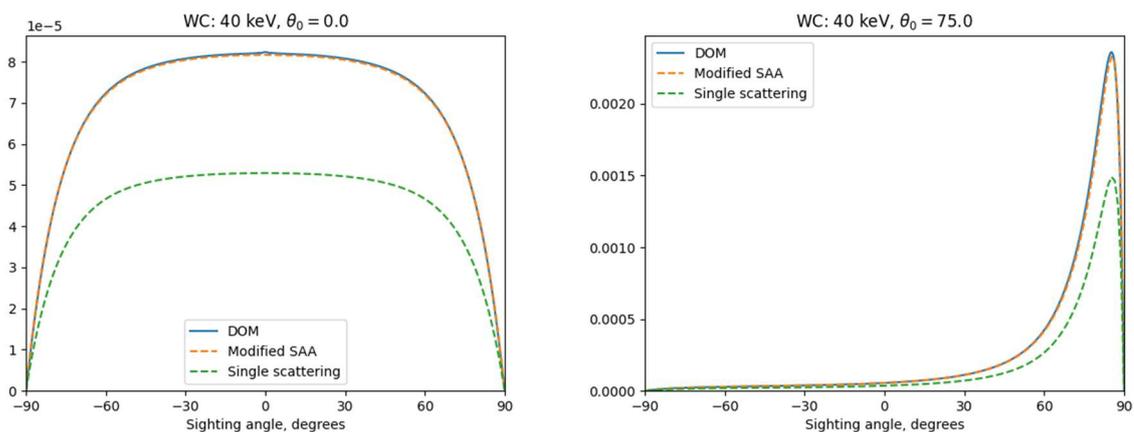


Рисунок 3.12 – Угловые распределения электронов, упруго отраженных от WC

Расчеты, выполненные на основе формул (3.29) и (3.31) позволяют получить результаты практически мгновенно при использовании любого стандартного вычислительного оборудования. Расчеты, выполненные методом дискретных ординат, требуют затраты большого количества времени. Стоит отметить возникновение физически необоснованных сингулярностей в численных расчетах, выполненных методом дискретных ординат, наиболее ярко наблюдаемых на рис. 3.2, 3.4, 3.6 и 3.10.

3.5.2 Учет влияния процесса многократного упругого рассеяния

Аналитическая методика описания сигналов СПУОЭ [A1, A2], развитая в настоящей работе, позволяет описывать как суммарную по всем компонентам соединения интенсивность пиков упруго отраженных электронов (3.29), так и интенсивность пиков электронов, упруго отраженных от отдельных атомов многокомпонентной мишени (3.31).

Для апробации разработанной в настоящей работе методики было проведено сравнение расчетов с результатами численного моделирования [12]. На рис. 3.13 представлены результаты сравнения:

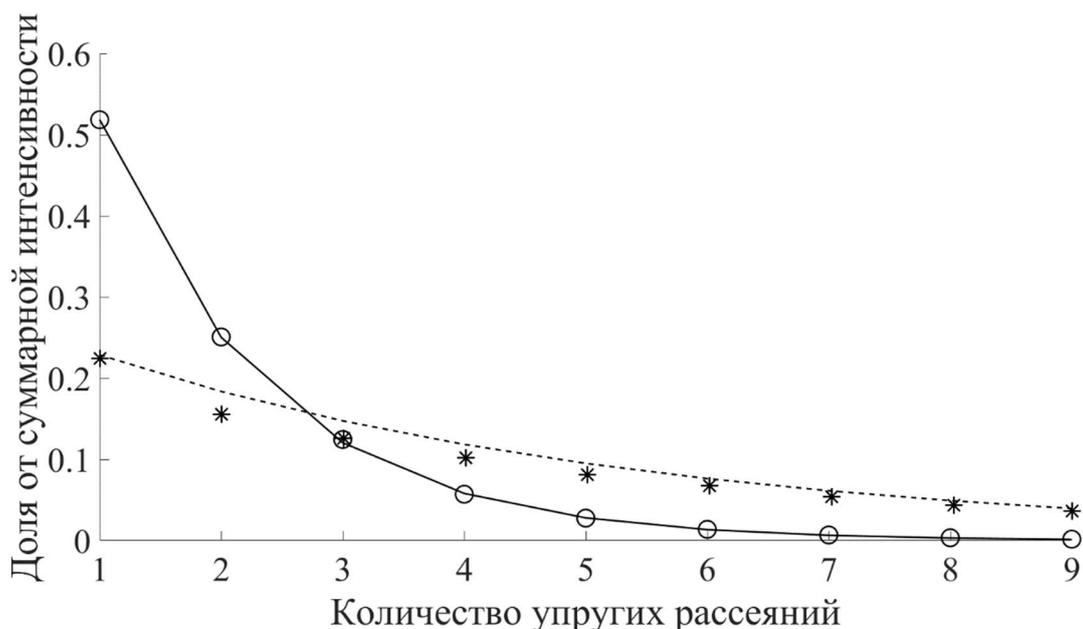


Рисунок 3.13 – Суммарная интенсивность электронов, упруго отраженных от всех компонент соединения Li_2CO_3 и HfO_2 , являющаяся результатом однократного, двукратного и т.д. процессов упругого рассеяния. Сплошная и пунктирная линии – расчет для Li_2CO_3 и HfO_2 соответственно на основе уравнения (3.29), кружки и звездочки – МК расчет для Li_2CO_3 и HfO_2 соответственно [12]

Рис. 3.13 демонстрирует удовлетворительное соответствие результатов расчета по разработанной в настоящей работе методике результатам численного моделирования.

Важным процессом, который учитывается в настоящей работе при выводе аналитической методики, является процесс многократного упругого рассеяния. Необходимость учета этого явления также демонстрирует рис. 3.13. Рис. 3.13 показывает, что двукратное, трехкратное и т.д. процессы упругого рассеяния вносят определяющий вклад в интенсивность пиков упруго отраженных электронов. Параметром, определяющим вклад упругих рассеяний различной кратности, является альbedo упругого рассеяния – λ . Чем выше значение λ , тем более значителен вклад многократного упругого рассеяния. Например, для соединения HfO_2 альbedo упругого рассеяния $\lambda \approx 0.799$, следовательно,

различие между результатами расчета в приближении однократного отклонения и результатами расчета с учетом эффекта многократного упругого рассеяния очень заметно, а именно, отношение отношения интенсивностей пиков упруго отраженных электронов для кислорода и гафния, посчитанные в приближении однократного отклонения, и отношения интенсивностей пиков упруго отраженных электронов для кислорода и гафния, посчитанные с учетом многократного упругого рассеяния, $R_{O1}/R_{O2} : R_{O1}^1/R_{O2}^1 \approx 7.45$:

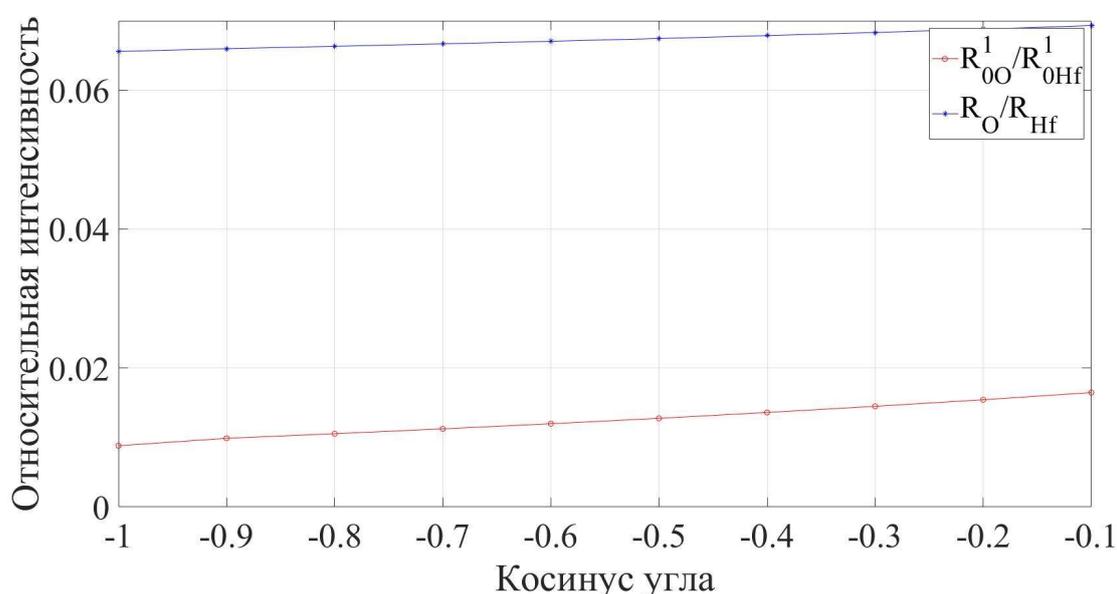


Рисунок 3.14 – Отношение интенсивностей пиков упруго отраженных электронов, вычисленное в приближении однократного отклонения (красная линия) и с учетом многократного упругого рассеяния (синяя линия)

Для соединения CH_2 альbedo упругого рассеяния $\lambda \approx 0.42$, следовательно, эффект многократного упругого рассеяния вносит в интенсивность пиков упруго отраженных электронов не столь значительный вклад, как в случае соединения HfO_2 , а именно, отношение отношения интенсивностей пиков упруго отраженных электронов для водорода и углерода, посчитанные в приближении однократного отклонения, и отношения интенсивностей пиков упруго

отраженных электронов для водорода и углерода, посчитанные с учетом многократного упругого рассеяния, $R_{01}/R_{02} : R_{01}^1/R_{02}^1 \approx 1.26$:

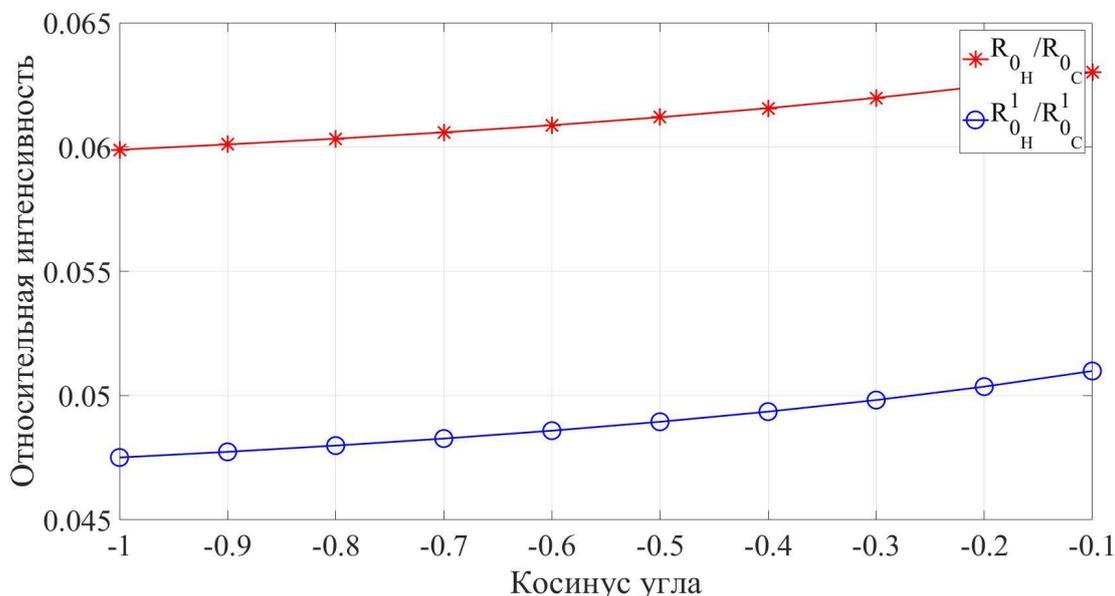


Рисунок 3.15 – Отношение интенсивностей пиков упруго отраженных электронов, вычисленное в приближении однократного отклонения (синяя линия) и с учетом многократного упругого рассеяния (красная линия)

Из рис. 3.14 и 3.15 можно сделать вывод, что многократное упругое рассеяние вносит значительный вклад в интенсивность пиков упруго отраженных электронов. Параметром, определяющим вклад эффекта многократного упругого рассеяния в интенсивность пиков упруго отраженных электронов, является альбедо упругого рассеяния. Чем выше значение λ , тем значительнее вклад упругих рассеяний большей кратности.

Особый интерес представляют ситуации, когда в многокомпонентной мишени сечение упругого рассеяния на одной из компонент значительно превышает сечение упругого рассеяния на других компонентах. Рассмотрим соединение CH_2 . В соответствии с сечением упругого рассеяния Резерфорда дифференциальное сечение упругого рассеяния углерода в 36 раз больше

дифференциального сечения упругого рассеяния водорода. Рассмотрим схему формирования пика упруго отраженных электронов от водорода.

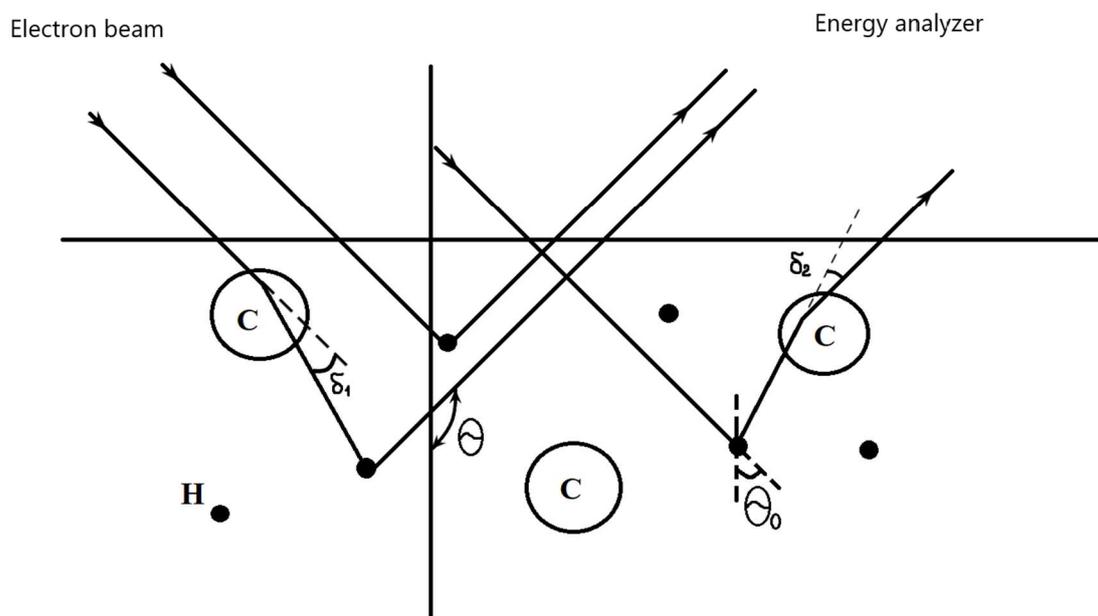


Рисунок 3.16 – Схема процессов однократного и двукратного процессов упругого рассеяния, приводящих к формированию пика электронов, упруго отраженных от соединения CH_2 . Схематически представлены сечения упругого рассеяния на углероде (кружок) и водороде (черная точка)

Из рис. 3.16 следует, что электрон до и после отражения на водороде на большой угол, равный $\theta + \theta_0$, будет совершать многократные малоугловые упругие рассеяния на углы δ преимущественно на углероде. Указанные многократные упругие рассеяния будут приводить к увеличению интенсивности пика электронов, упруго отраженных от водорода. Таким образом, эффект многократного упругого рассеяния будет наиболее заметен для соединений, где наряду с легкой компонентой будет присутствовать тяжелая компонента. Именно в связи с этим эффект многократного упругого рассеяния наиболее заметен на соединении HfO_2 , в котором сечение упругого рассеяния на гафнии в 81 раз больше сечения упругого рассеяния на кислороде.

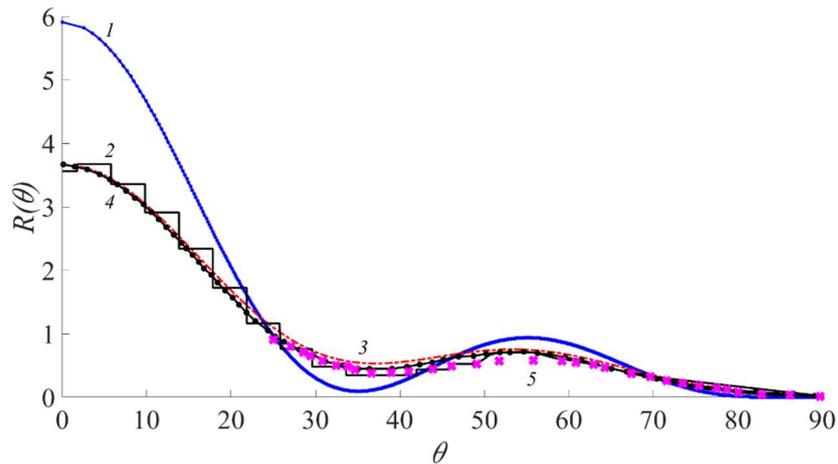


Рисунок 3.17 – Угловое распределение электронов, упруго отраженных от золота. Зондирование по нормали, начальная энергия зондирующих электронов $E_0 = 5$ кэВ. 1 – приближение однократного рассеяния, 2 – МК моделирование [111], 3 – малоугловое приближение, 4 – расчет на основе метода дискретных ординат (MDOM) [112], 5 (крестики) – эксперимент [113]

Из рис. 3.17 видно удовлетворительное соответствие расчетов по разработанной в настоящей работе методике результатам численного моделирования [111,112] и результатам эксперимента [113]. Как показано на рис. 3.17, теория, базирующаяся на решении задачи упругого рассеяния в приближении однократного отклонения, не совпадает с результатами численного моделирования и результатами эксперимента, что говорит о ее несостоятельности при описании сигналов СПУОЭ. Причины этого несоответствия указаны выше.

3.6 Определение содержания изотопов водорода в углеводородных и бериллиевых образцах

Влияние водорода и его изотопов, являющихся ключевыми компонентами термоядерного топлива, на химические и физические свойства материалов является важной темой в материаловедении, особенно в контексте термоядерной энергетики. Водород может значительно ускорять коррозию металлов,

используемых в качестве конструкционных в установках термоядерного синтеза, например, вольфрама и молибдена. Как показали исследования молибденовых и танталовых «первых» зеркал [114], наличие водорода в материалах значительно увеличивает скорость и степень окисливания. Тантал, являясь крайне химически стойким материалом, в результате насыщения водородом мгновенно окисляется на атмосфере. С точки зрения физических свойств, водород может вызывать охрупчивание металлов. Его поглощение приводит к образованию атомов в кристаллической решетке, что способствует образованию микротрещин и снижает пластичность, особенно в высокопрочных сталях и титане. Исследования молибденовых «первых» зеркал на токамаке EAST показали, что водород, обладая высочайшим коэффициентом диффузии, вызывает активное дефектообразование, что, в свою очередь ускоряет окисливание материалов и дальнейшее их разрушение. Использование углеродных материалов в качестве материала первой стенки термоядерных реакторов и наличие водорода приводит к образованию углеводородных покрытий, что приводит к «третиевой» проблеме. Таким образом, исследование содержания водорода и его изотопов в конструкционных материалах термоядерных установок и наличие методов его анализа является первостепенной задачей.

Из формулы (1.13) следует, что атомы водорода, обладая наименьшей атомной массой, имеют наибольший энергетический сдвиг упругого пика в энергетическом спектре спектроскопии пиков упруго отраженных электронов, поэтому упругие пики, соответствующие изотопам водорода, могут быть хорошо разрешены на установках, реализующих СПУОЭ анализ.

Продемонстрируем возможность определения относительной концентрации изотопов водорода на примере углеводородного образца и бериллиевого образца, имплантированного дейтерием [А6]. Как уже было отмечено выше, количественная расшифровка спектров СПУОЭ является непростой задачей в связи с тем, что упругий пик водорода находится в области потерь энергии, образованной неупруго рассеянными электронами, поэтому

точный анализ может быть проведен с помощью дополнительно проведенных измерений энергетических спектров образцов с помощью рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии, из экспериментальных данных которой можно восстановить дифференциальное сечение неупругого рассеяния электронов в рассматриваемом материале. Методика расшифровки спектров СПУОЭ с различимыми пиками, образованными упруго рассеянными от атомов электронами, выполняется следующим образом: сперва из РФЭС спектров восстанавливается сечение $x_{in}(\Delta)$, затем полученное сечение $x_{in}(\Delta)$ используется для вычисления сигнала многократного неупругого рассеяния электронов в СПУОЭ и определения искомым характеристик образца.

На рис. 3.18 представлен РФЭС спектр 1s линии углерода, снятый с высоким разрешением. Описание РФЭС спектра проведено согласно методике, которая будет представлена в пятой главе диссертационного исследования. Методика восстановления дифференциального сечения неупругого рассеяния электронов будет представлена там же.

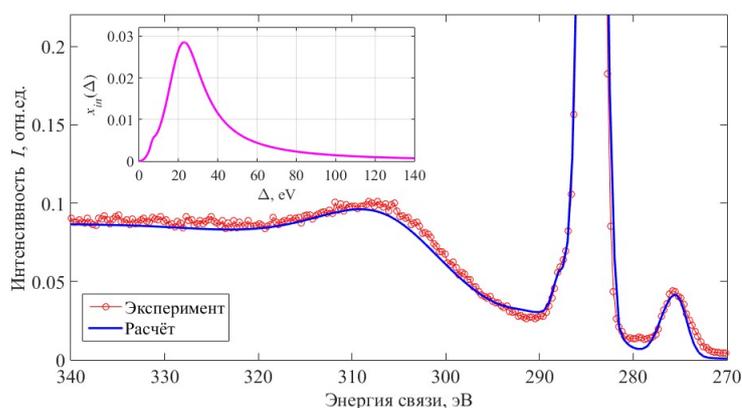


Рисунок 3.18 – РФЭС спектр 1s линии углерода, снятый в высоком разрешении.

В верхнем левом углу – дифференциальное сечение неупругого рассеяния электронов в углеводородном образце, восстановленное из измеренного РФЭС спектра

Разница между экспериментальными данными и расчетным спектром в области потерь энергии 2990 – 2998 в спектрах СПУОЭ связана с потерями энергии электронов на упругое отражение от атомов водорода. Количественный СПУОЭ анализ проведен согласно методике, описанной в пп. 3.2 и 3.4. Предположено, что исследуемый образец представляет собой однородный слой толщиной порядка $l_{in} = 6.5$ нм (что определяет информационную глубину СПУОЭ анализа для энергии 3 кэВ). В результате процедуры подбора установлено, что относительная концентрация водорода в данном образце равна $n_H/n_C = 1.3 \pm 0.1$. Стоит отметить, что установленная относительная концентрация водорода в образце усреднена в слое, толщиной, определяемой l_{in} . Изменение начальной энергии зондирующего пучка электронов позволит изменить информационную глубину СПУОЭ анализа, таким образом, осуществить энергетическое сканирование исследуемого образца и восстановить послойный профиль водорода.

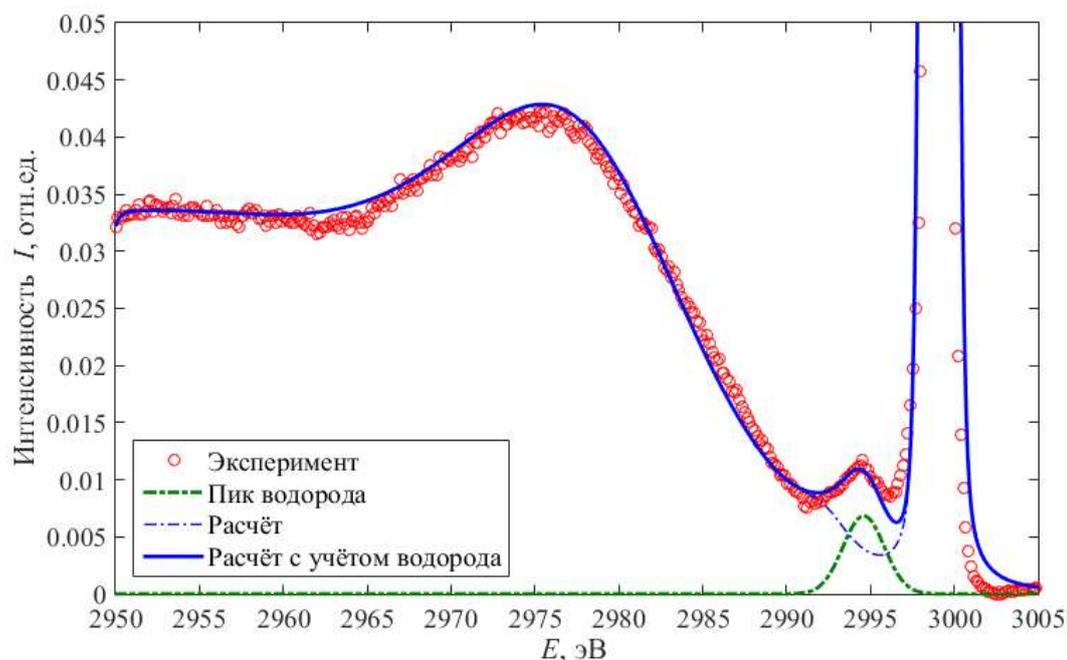


Рисунок 3.19 – СПУОЭ спектр углеводородного образца

Аналогичный анализ был проведен с образцом бериллия, имплантированным дейтерием. Доза имплантированного дейтерия составляла $5.5 \cdot 10^{21} \text{ м}^{-2}$ и $20.1 \cdot 10^{21} \text{ м}^{-2}$. СПУОЭ спектры сняты для начальной энергии зондирующего пучка электронов 5 кэВ. Информационная глубина СПУОЭ анализа, определяемая величиной l_{in} , в данном случае составила 7 нм. Относительная концентрация дейтерия в бериллии составила величину $n_D/n_{Be} = 0.14 \pm 0.01$.

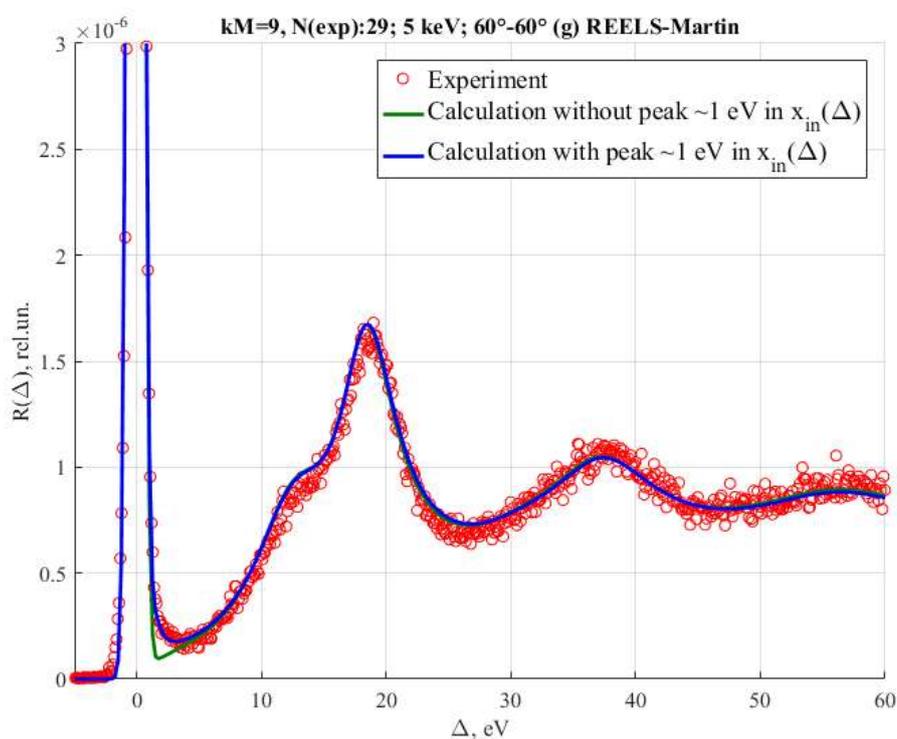


Рисунок 3.20 – СПУОЭ спектр бериллиевого образца, имплантированного дейтерием. Доза имплантированного дейтерия $5.5 \cdot 10^{21} \text{ м}^{-2}$. Кружки – эксперимент; зеленая линия – расчет без учета пика дейтерия; синяя – линия расчет с учетом пика дейтерия

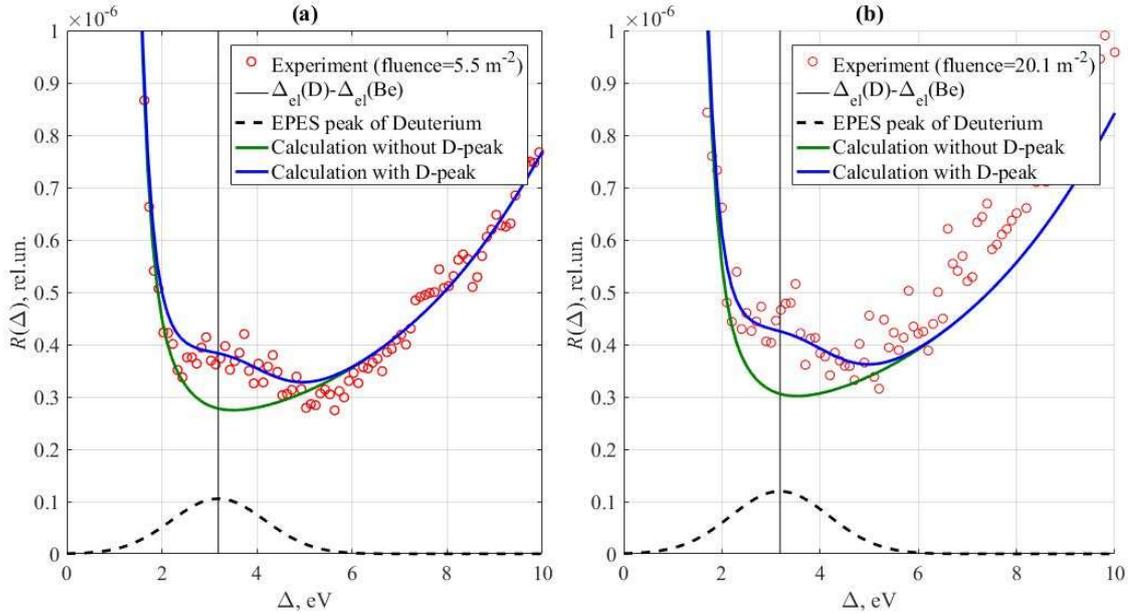


Рисунок 3.21 – СПУОЭ спектр в высоком разрешении

3.7 Спектроскопия отраженных электронов

С помощью спектроскопии пиков упруго отраженных электронов возможно определение изотопного состава материала на глубинах порядка l_{in} , составляющих, как правило, единицы нанометров. Для определения содержания водорода в материале на больших глубинах используют спектроскопию отраженных электронов (СОЭ). Информационная глубина метода СОЭ составляет величину порядка l_{tr} – транспортной длины пробега, обычно составляющую сотни нанометров, а иногда и достигающую нескольких микрометров. Например, при зондировании электронами с начальной энергией $E_0 = 10$ кэВ углеродной мишени величина $l_{tr} = 135.55$ нм; с начальной энергией $E_0 = 20$ кэВ величина $l_{tr} = 476.49$ нм, а для мишени из бериллия при той же начальной энергии зондирующих электронов величина $l_{tr} = 953.05$ нм, что практически равно 1 мкм.

На рис. 3.22 в качестве примера приведены энергетические спектры отраженных электронов:

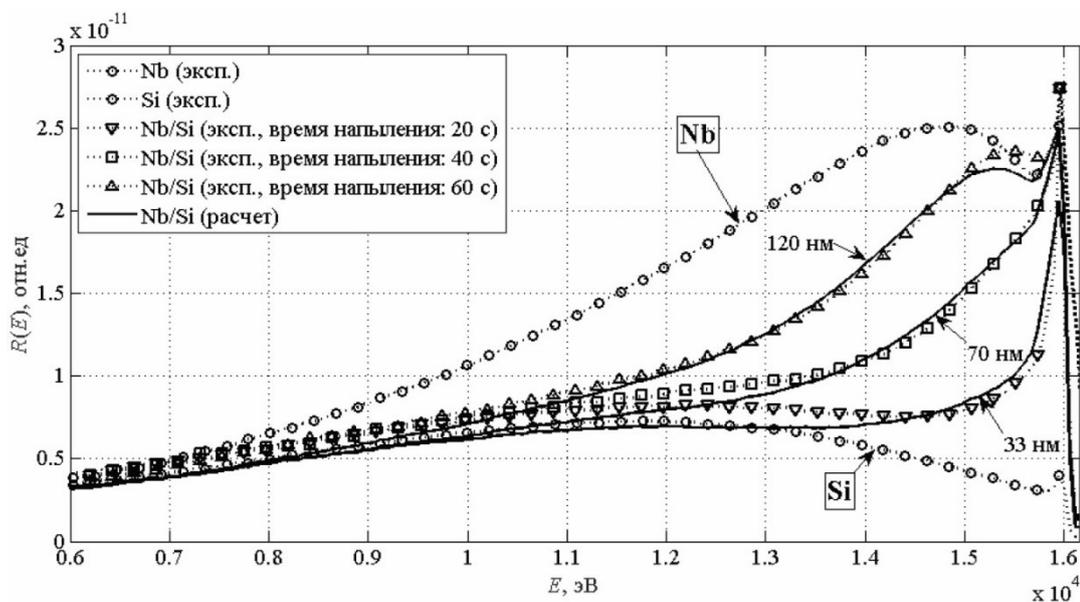


Рисунок 3.22 – Энергетические спектры электронов, отраженных от многослойного материала, состоящего из кремниевой подложки с слоями напыленного ниобия

Аналитическая методика описания энергетических распределений отраженных электронов, построенная методом частичных интенсивностей (формулы (3.10, 3.11, 3.12)), позволяет описывать результаты СОЭ с удовлетворительной точностью. Ниже представлены результаты описания энергетических спектров электронов, отраженных от однокомпонентных мишеней.

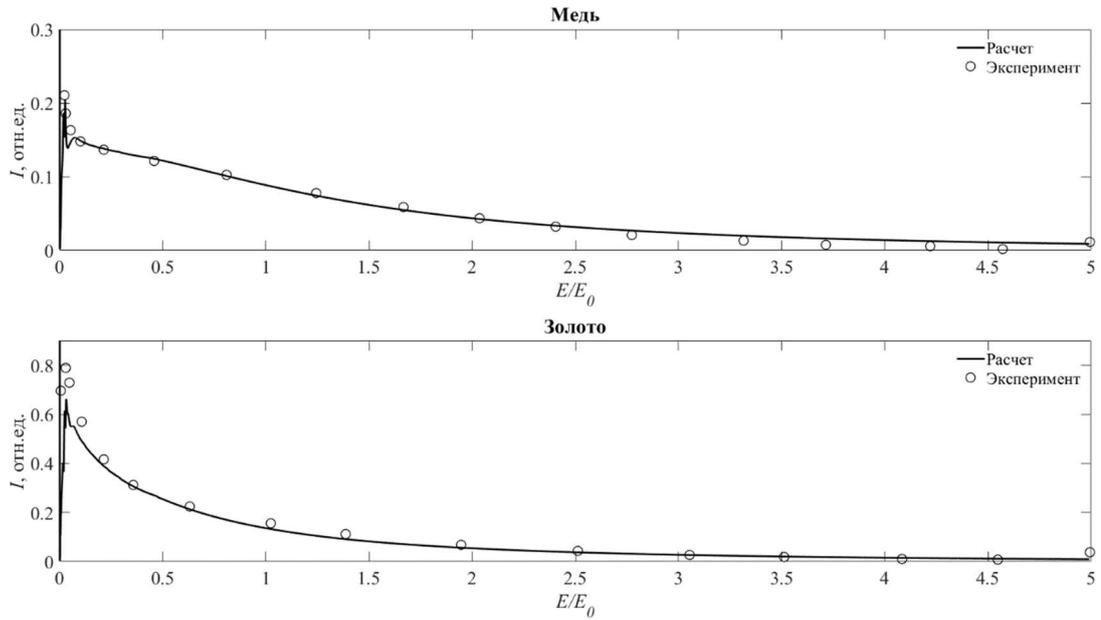


Рисунок 3.23 – Энергетические спектры электронов, отраженных от медной и золотой мишени. Энергия зондирующих электронов $E_0 = 5$ кэВ. Нормальное падение, отражение на 138° . Эксперимент [115]

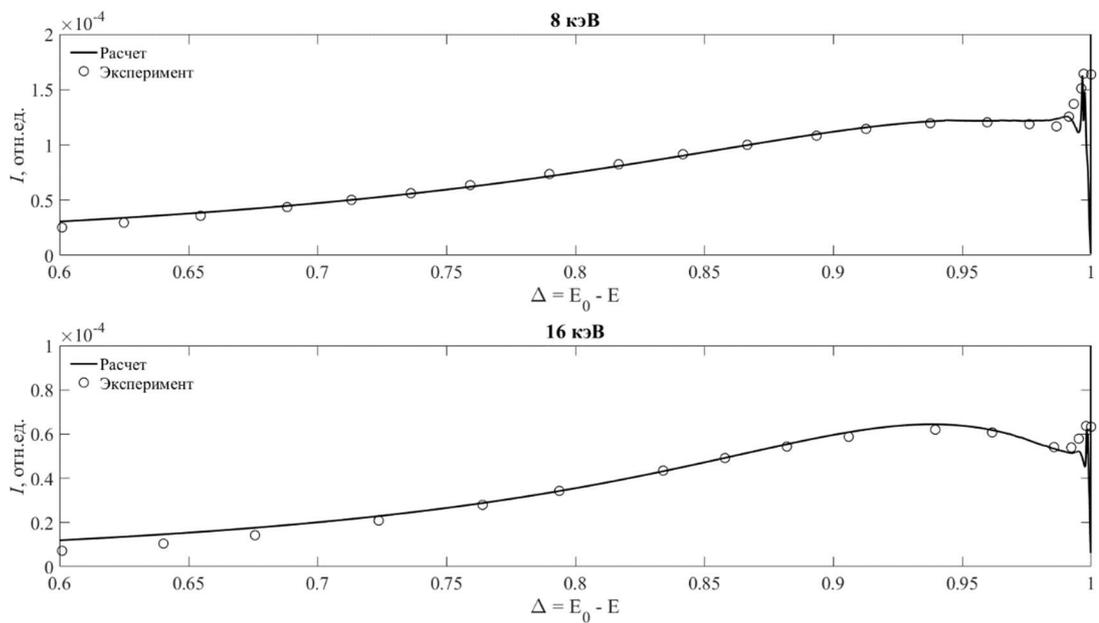


Рисунок 3.24 – Энергетические спектры электронов, отраженных от медной мишени. Энергия зондирующих электронов $E_0 = 8$ и 16 кэВ. Нормальное падение, отражение на 135° . Эксперимент [27]

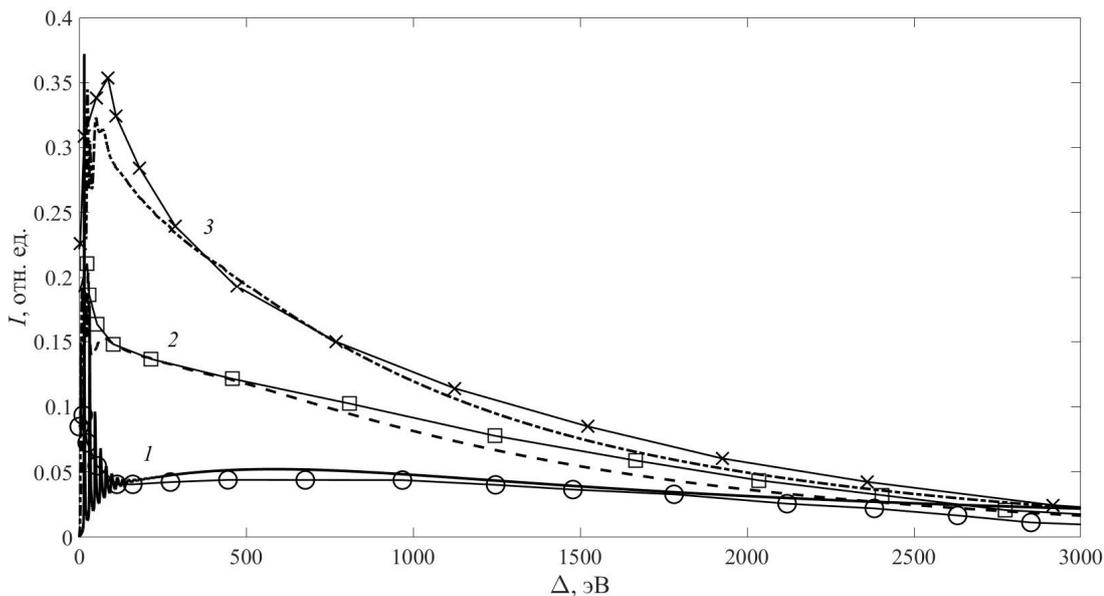


Рисунок 3.25 – Энергетические спектры электронов, отраженных от однокомпонентных мишеней Al (1), Cu (2), Ag (3). Падение по нормали к поверхности; рассеяние на 135° . Начальная энергия электронов $E_0 = 5$ кэВ.

Линии – расчет; значки – эксперимент [115–117]

Рис. 3.23 – 3.25 демонстрируют удовлетворительное совпадение расчетных и экспериментальных распределений. Несоответствия в области малых потерь энергии связаны с низким разрешением полученных экспериментальных данных. При выполнении расчетов коэффициенты x_l , определяемые сечением упругого рассеяния, вычислялись на основе сечений, представленных в НИСТ [8], величины $x_{in}(\Delta)$ определялись в соответствии с методиками, изложенными в работах [82–85].

Рассмотрим описание энергетических СОЭ спектров электронов, отраженных от многокомпонентных и слоисто-неоднородных мишеней.

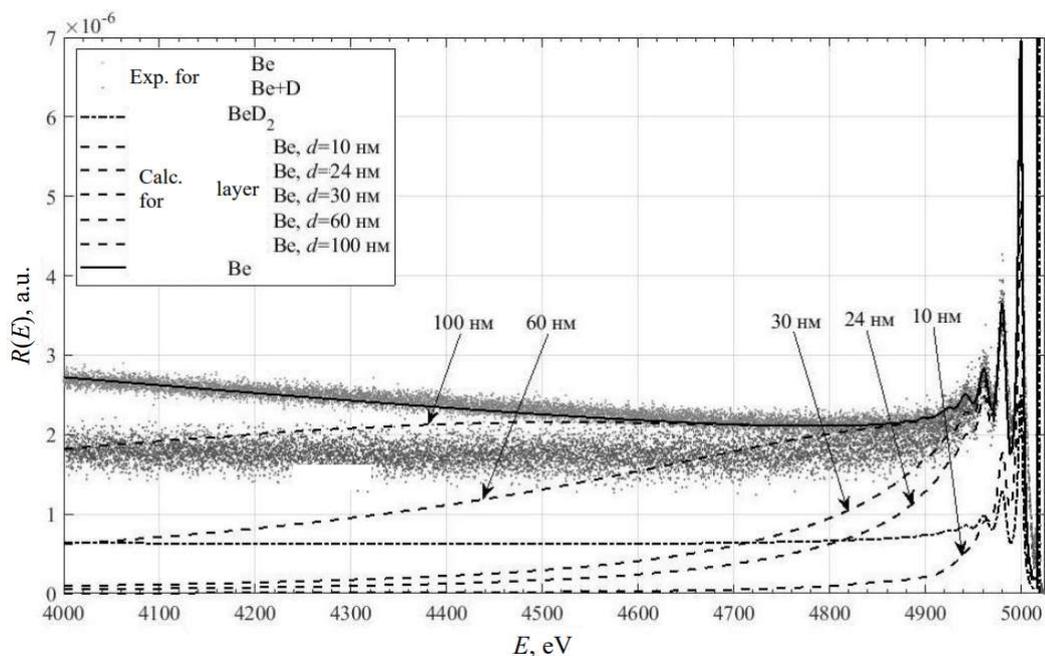


Рисунок 3.26 – Энергетические спектры электронов, отраженных от мишени из чистого бериллия и мишени из бериллия, имплантированного дейтерием. Доза имплантированного дейтерия $5.5 \cdot 10^{21} \text{ м}^{-2}$. Начальная энергия электронов $E_0 = 5$ кэВ. Нормальное падение, отражение на 135° . Расчет на основе разработанной аналитической методики. Эксперимент [118]

Рис. 3.26 демонстрирует удовлетворительное совпадение расчетных и экспериментальных данных. Спектры, представленные на рис. 3.26, позволяют в результате процедуры подбора восстановить глубину, равную 24 нм, начиная с которой в мишени наблюдается заметное содержание дейтерия, и относительную концентрацию атомов дейтерия и бериллия в единице объема, составляющую 0.14.

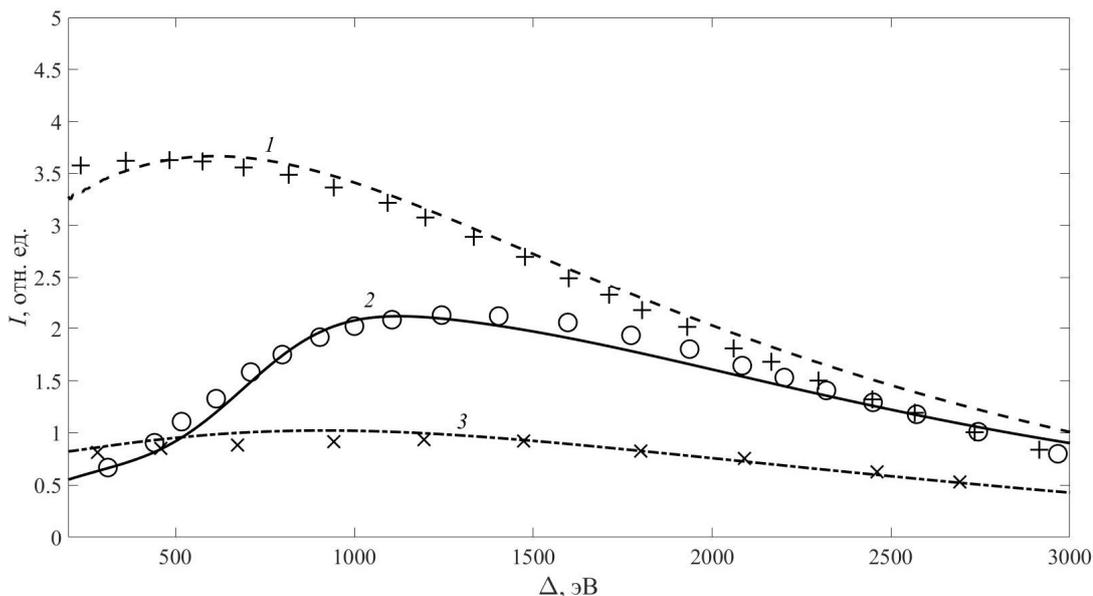


Рисунок 3.27 – Энергетические спектры электронов, отраженных от полубесконечного кремния Si (1); полубесконечного углерода C (3); углеводородной пленки на кремниевой подложке $\text{CH}_{0.7}\text{Si}$ (2). Падение по нормали к поверхности; рассеяние на 120° . Начальная энергия электронов $E_0 = 5$ кэВ. Линии – расчет; значки – эксперимент

На рис. 3.27 представлена интерпретация энергетических спектров электронов, отраженных от мишени, состоящей из углеводородной пленки на кремниевой подложке. Представленные на рис. 3.27 спектры иллюстрируют возможность определения послойного состава многокомпонентной неоднородной мишени с помощью спектроскопии отраженных электронов. Расшифровка экспериментальных результатов СОЭ базируется на процедуре подбора наилучшего совпадения расчетных и экспериментальных данных, чего в данном случае удастся добиться, предположив, что слой соединения $\text{CH}_{0.7}$ толщиной 40 нм находится на поверхности Si.

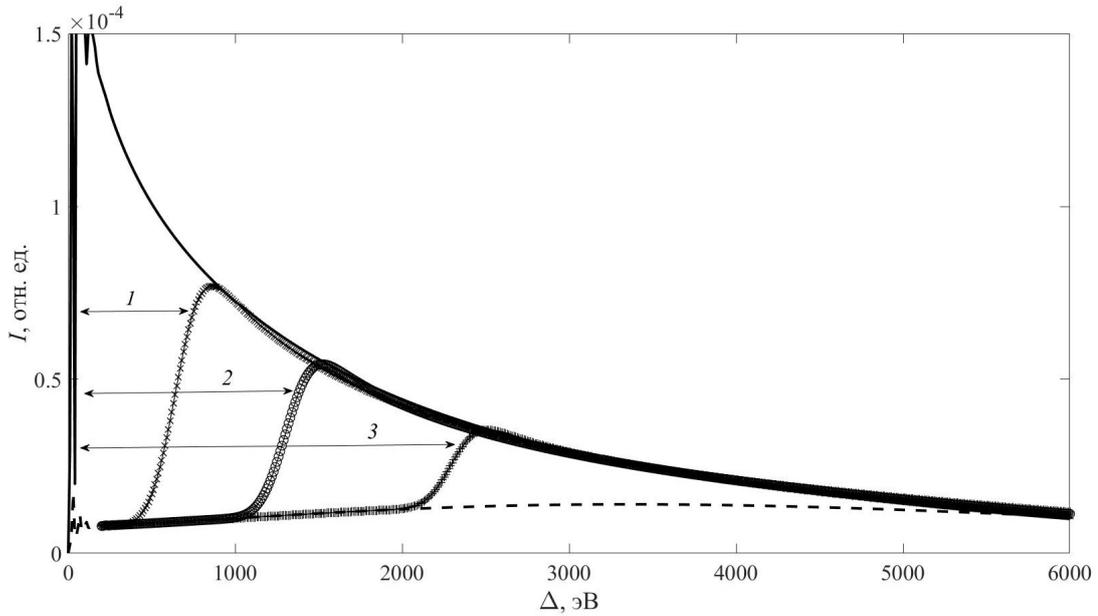


Рисунок 3.28 – Энергетические спектры электронов, отраженных от чистого вольфрама (сплошная линия), чистого бора (штриховая линия) и вольфрама, покрытого слоями бора различной толщины: (1) – 50; (2) – 100; (3) – 175 нм

Энергетические спектры, представленные на рис. 3.28, демонстрируют возможность простого и наглядного определения толщин слоев компоненты со значительно меньшим атомным номером, чем материал подложки. Энергетические интервалы 1, 2 и 3, указанные на рис. 3.28, позволяют определять толщины слоев бора аналогично тому, как это делается в методиках обратного Резерфордского рассеяния:

$$\Delta_{1,2,3} = \overline{\varepsilon}_B d_B^{1,2,3} \left(\frac{1}{\mu_0} + \frac{1}{\mu} \right), \quad (3.33)$$

где d_B – толщина слоя бора; $\overline{\varepsilon}_B$ – средние потери энергии электронов на единицу длины в боре.

Процедура определения толщины исследуемого покрытия строится следующим образом: например, в случае бора, по рис. 3.28 определяем $\Delta_2 = 1200$ эВ, из таблиц НИСТ находим средние потери энергии электронов на единицу длины в боре $\overline{\varepsilon}_B = 4.4$ эВ/нм, с учетом геометрии рассеяния, равной $\mu_0 = 1$, $\mu = 0.5$, определяем толщину слоя бора на вольфраме, равную $d_B^2 = 0.1$ мкм.

Отметим, что справедливость использования формулы (3.33) ограничена условием $d(1/\mu_0 + 1/\mu) \ll l_{tr}$, где l_{tr} – транспортная длина пробега электронов.

3.8 Основные результаты и выводы третьей главы

Показано определяющее влияние процесса многократного упругого рассеяния на интенсивность пиков упруго отраженных электронов. Показана несостоятельность модели (формула (3.29)) для расчета интенсивностей пиков электронов, упруго отраженных от отдельных компонент мишени сложного состава. Сравнение результатов расчетов методами дискретных ординат и МК моделирования с построенной аналитической методикой продемонстрировало высокую точность расчетов интенсивностей пиков электронов, упруго отраженных от отдельных компонент мишени, на основе разработанной малоугловой теории.

Продемонстрирована возможность определения относительных концентраций изотопов водорода на основе измерения спектров СПУОЭ. Продемонстрирована возможность определения послойных профилей мишени на основе измерения спектров СОЭ.

Построена методика расчета дифференциальных по углам и энергии спектров электронов, отраженных от однородных однокомпонентных и слоисто-неоднородных многокомпонентных мишеней. Показано хорошее соответствие расчетов, выполненных с использованием представленной методики, экспериментальным данным.

Определение параметров исследуемой мишени, таких как толщина углеводородного слоя, профиль концентрации протия в углеводородах и дейтерия в бериллии, толщина слоя бора на вольфраме строится на основе процедуры подбора, требующей многократного выполнения расчетов с вариацией подгоночных параметров. Построенная в настоящей работе методика вычислений позволит проводить их практически мгновенно на стандартном вычислительном оборудовании.

Глава 4. Аналитическое описание процессов взаимодействия потоков легких ионов с конструкционными материалами

Взаимодействие легких ионов с твердым телом представляет актуальность с точки зрения множества технологических задач (модификация поверхности ионными пучками, ионный миксинг и т.д.) [2]. Понимание механизмов взаимодействия легких ионов с твердым телом необходимо при описании сигналов таких методик анализа поверхности, как Ion Scattering Spectroscopy (ISS), Rutherford Back Scattering (RBS), Medium Energy Ion Spectroscopy (MEIS), Low Energy Ion Spectroscopy (LEIS).

Основой существующих в настоящее время теорий, описывающих процесс взаимодействия легких ионов с твердым телом, является решение задачи упругого взаимодействия с помощью приближения прямолинейных траекторий. Описание взаимодействия легких ионов с твердым телом на основе приближения прямолинейных траекторий вошло в такие классические книги по ионному рассеянию, как [1,3,5,31].

Приближение одного отклонения или приближение прямолинейных траекторий подразумевает, что частица, до и после одного упругого рассеяния на большой угол, переводящий ее нисходящее движение в восходящее, движется по прямым траекториям без каких-либо упругих соударений. Величиной, определяющей применимость приближения прямолинейных траекторий, является отношение остаточного пробега частицы R_0 к длине транспортного пробега или к длине полной изотропизации потока частиц l_{tr} . Транспортная длина обозначает длину траектории потока частиц, при которой он становится полностью изотропным, т.е. средний квадрат угла рассеяния частиц равен 1 радиану или 58° . Если отношение $R_0/l_{tr} \ll 1$, т.е. $R_0 \ll l_{tr}$, приближение прямолинейных траекторий для описания упругого взаимодействия ионов с твердым телом применимо, т.к. поток частиц остановится в мишени прежде, чем произойдет искривление траекторий частиц на значительный угол относительно

изначального направления их движения. Это условие выполняется для потока ионов с начальной энергией в несколько мэгаэлектронвольт, т.е. для тех ионов, которые используются в методике RBS.

Однако, для ионов с энергией, находящейся в интервале $1 < E_0 < 100$ килоэлектронвольт, т.е. для тех ионов, которые используются в методике MEIS, и для «термоядерных» ионов, приближение прямолинейных траекторий неприменимо. Связано это с тем, что при таких энергиях длина полной изотропизации становится соизмеримой величиной с величиной остаточного пробега, т.е. $R_0 \sim l_{tr}$, следовательно, ионы до и после упругого соударения, переводящего их нисходящее движение в восходящее, будут испытывать многократное упругое соударение на малые углы. Неприменимость приближения прямолинейных траекторий для описания взаимодействия легких ионов с твердым телом иллюстрирует следующий рисунок:

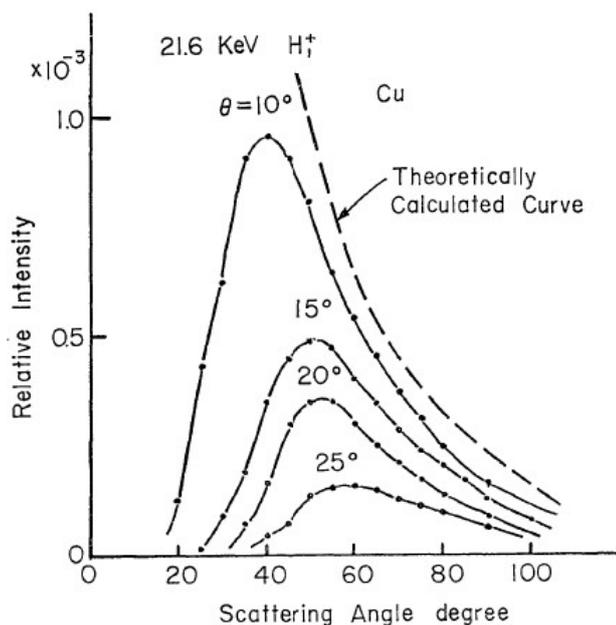


Рисунок 4.1 – Угловые распределения отраженных от медной мишени протонов [3]

На рис. 4.1 кривые с максимумом демонстрируют экспериментальные угловые распределения протонов, отраженных от медной мишени. Кривая без

максимума – аналитический расчет в приближении прямолинейных траекторий. Из данных рис. 4.1 видно, что приближение прямолинейных траекторий ни качественно, ни количественно не описывает экспериментальные данные. Далее в работе будет приведено еще множество неудачных попыток описания экспериментальных данных с помощью приближения прямолинейных траекторий. Попытки описания с помощью приближения двукратных и трехкратных упругих соударений также не обвенчались успехом, как показано в [3].

Таким образом, целью, стоящей перед автором данной работы, является создание аналитической методики, качественно и количественно описывающей процесс взаимодействия легких ионов с твердым телом. Этой задаче посвященная данная глава [A3, A4, A7, A8, A9].

Аналитическая методика описания процесса взаимодействия легких ионов с твердым телом строится на раздельном решении двух независимых задач: задача упругого рассеяния легких ионов на ядрах атомов мишени и задача неупругого рассеяния легких ионов на электронных оболочках атомов мишени, что справедливо согласно гипотезе Ферми (2.2). Решение граничной задачи для уравнения упругого переноса легких ионов в твердом теле представлено в главе 2. Решение (2.32) справедливо как для рассеяния легких ионов, так и для рассеяния электронов в твердом теле. Отличие состоит лишь в выборе сечения упругого рассеяния.

4.1 Решение граничной задачи для уравнения неупругого переноса легких ионов. Решение Фоккера-Планка

Для решения граничной задачи для уравнения неупругого переноса (2.7) его следует дополнить граничными условиями, учитывающими, что моноэнергетический, мононаправленный, широкий поток частиц падает на верхнюю границу:

$$R(0, \Delta) = R_0 \delta(\Delta). \quad (4.1)$$

Запишем уравнение (2.7) в следующем виде:

$$\frac{\partial}{\partial \tau} R(\tau, \Delta) = -R(\tau, \Delta) + \int_0^{\Delta} R(\tau, \Delta - \varepsilon) x_{in}(\varepsilon) d\varepsilon, \quad (4.2)$$

где $\tau = \frac{z}{l_{in}}$ – пробег частицы в мишени, измеренный в длинах свободного пробега между двумя актами неупругого рассеяния; l_{in} – длина свободного пробега между двумя актами неупругого рассеяния.

Традиционным методом описания неупругого взаимодействия ионов с твердым телом является приближение Фоккера-Планка [5]. Это приближение основано на том, что функция $x_{in}(\Delta)$, т.е. сечение неупругого рассеяния ионов, имеет резкий максимум при $\Delta \rightarrow 0$, что справедливо в модели Томсона:

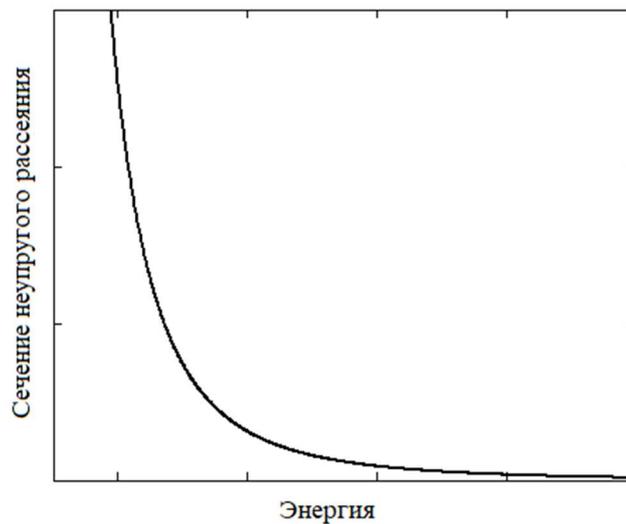


Рисунок 4.2 – Модель сечения Томсона

В этом случае возможно разложение подынтегральной функции $R(\tau, \Delta - \varepsilon)$ в уравнении (4.2) в ряд Тейлора вблизи $\varepsilon \rightarrow 0$:

$$R(\tau, \Delta - \varepsilon) = R(\tau, \Delta) + \frac{\partial R(\tau, \Delta)}{\partial \Delta} \varepsilon + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 R(\tau, \Delta)}{\partial \Delta^2} \varepsilon^2 + \dots \quad (4.3)$$

Ограничившись тремя слагаемыми разложения (4.3) и подставив их в подынтегральное слагаемое уравнения (4.2), получим:

$$\frac{\partial}{\partial \tau} R(\tau, \Delta) = -R(\tau, \Delta) + \int_0^{\Delta} \left[R(\tau, \Delta) + \frac{\partial R(\tau, \Delta)}{\partial \Delta} \varepsilon + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 R(\tau, \Delta)}{\partial \Delta^2} \varepsilon^2 \right] x_{in}(\varepsilon) d\varepsilon. \quad (4.4)$$

Вынесем из-под знака интеграла функции, независящие от переменной, по которой происходит интегрирование:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \tau} R(\tau, \Delta) = & -R(\tau, \Delta) + R(\tau, \Delta) \int_0^{\Delta} x_{in}(\varepsilon) d\varepsilon + \frac{\partial R(\tau, \Delta)}{\partial \Delta} \int_0^{\Delta} \varepsilon \cdot x_{in}(\varepsilon) d\varepsilon + \\ & \frac{1}{2} \frac{\partial^2 R(\tau, \Delta)}{\partial \Delta^2} \int_0^{\Delta} \varepsilon^2 \cdot x_{in}(\varepsilon) d\varepsilon. \end{aligned} \quad (4.5)$$

Т.к. $x_{in}(\Delta)$ – нормированное на единицу сечение неупругого рассеяния, то $\int_0^{\Delta} x_{in}(\varepsilon) d\varepsilon = 1$.

Интеграл вида $\int_0^{\Delta} \varepsilon \cdot x_{in}(\varepsilon) d\varepsilon$ представляет из себя величину средних потерь энергии ионов на единице длины или $\bar{\varepsilon}$. Интеграл вида $\int_0^{\Delta} \varepsilon^2 \cdot x_{in}(\varepsilon) d\varepsilon$ представляет из себя величину среднего квадрата потерь энергии ионов на единице длины или $\bar{\varepsilon}^2$.

Таким образом, с учетом вышеуказанных величин уравнение (4.5) преобразуется в уравнение Фоккера-Планка:

$$\frac{\partial}{\partial \tau} R(\tau, \Delta) = \frac{\partial R(\tau, \Delta)}{\partial \Delta} \bar{\varepsilon} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 R(\tau, \Delta)}{\partial \Delta^2} \bar{\varepsilon}^2. \quad (4.6)$$

Решение уравнения (4.6):

$$R(\tau, \Delta) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\bar{\varepsilon}^2\tau}} e^{-\frac{(\Delta - \bar{\varepsilon}\tau)^2}{2(\bar{\varepsilon}^2\tau)}}. \quad (4.7)$$

Решение (4.7) описывает распределение отраженных ионов, прошедших путь τ в мишени, по потерям энергии. В отличие от решения Ландау (3.7), в котором в качестве величины, описывающей неупругие потери энергии частиц, фигурирует сечение неупругого рассеяния $x_{in}(\Delta)$, в решении Фоккера-Планка (4.7) учитываются лишь первые два момента сечения неупругого рассеяния ионов – средние потери энергии на единице длины $\bar{\varepsilon}$ и средний квадрат потерь энергии на единице длины $\bar{\varepsilon}^2$.

4.2 Энергетические спектры отраженных легких ионов

Энергетические спектры отраженных ионов рассчитываются как свертка решения упругой и неупругой задачи:

$$R(\Delta, \mu_0, \mu, \varphi_0, \varphi) = \int_0^\infty R\left(\frac{z}{l_{el}}, \mu_0, \mu, \varphi_0, \varphi\right) N\left(\frac{z}{l_{in}}, \Delta\right) dz. \quad (4.8)$$

В качестве функции $R\left(\frac{z}{l_{el}}, \mu_0, \mu, \varphi_0, \varphi\right)$ воспользуемся решением (2.33), полученным в приближении прямолинейных траекторий.

Для упрощения процедуры интегрирования функцию $N\left(\frac{z}{l_{in}}, \Delta\right)$ в дальнейшем будем представлять в приближении непрерывного замедления, т.е. когда $N\left(\frac{z}{l_{in}}, \Delta\right) = \delta(\Delta - \bar{\varepsilon}z)$. Это приближение справедливо, если в решении Фоккера-Планка положить $\bar{\varepsilon}^2 = 0$, т.е. пренебречь флуктуациями энергетических потерь. Однако, в итоге будет получено решение, удовлетворяющее решению Фоккера-Планка, т.к. полученный энергетический спектр будет свернут с распределением Гаусса, учитывающим все возможные уширения.

Подставим решение (2.33) и $N\left(\frac{z}{l_{in}}, \Delta\right) = \delta(\Delta - \bar{\varepsilon}z)$ в уравнение (4.8):

$$R(\Delta, \mu_0, \mu, \varphi_0, \varphi) = \int_0^\infty \frac{\mu_0|\mu|}{\mu_0+|\mu|} x_{el}(\mu_0, \mu, \varphi_0, \varphi) \delta(\Delta - \bar{\varepsilon}z) dz. \quad (4.9)$$

С учетом упругих потерь энергии, определяемых кинематическим фактором:

$$k(\theta, M_1, M_2) = \left(\frac{(M_2^2 - M_1^2 \sin^2 \theta)^{1/2} + M_1 \cos \theta}{M_2 + M_1} \right)^2, \quad (4.10)$$

где M_1 – масса налетающего иона; M_2 – масса атома мишени; θ – угол рассеяния иона, энергетическое распределение отраженных ионов определяется в соответствии с следующей формулой:

$$R(\Delta, \mu_0, \mu, \varphi_0, \varphi) = \frac{\mu_0|\mu|}{\mu_0+|\mu|} \frac{1}{\bar{\varepsilon}} x_{el}(\mu_0, \mu, \varphi_0, \varphi) \Theta(\Delta + E_0 \cdot (k(\theta, M_1, M_2) - 1)), \quad (4.11)$$

где $\Theta(\Delta + E_0 \cdot (k(\theta, M_1, M_2) - 1))$ – тэтта функция.

Результат учета зависимости сечения от энергии зависит от энергии зондирующего пучка ионов. Для ионов с энергией $E > 100$ кэВ, средние потери энергии на единице длины пути обратно пропорциональны энергии – $\bar{\varepsilon} \sim \frac{1}{E}$; для ионов с меньшей энергией – $\bar{\varepsilon} \sim \sqrt{E}$. Сечение упругого рассеяния при любых энергиях зондирующего пучка ионов – $x(\mu) \sim \frac{1}{E^2}$. Таким образом, уравнение (4.11) с учетом зависимости $x(\mu)$ и $\bar{\varepsilon}$ от энергии в области термоядерных энергий выглядит следующим образом:

$$R(\Delta, \mu_0, \mu, \varphi_0, \varphi) = \frac{\mu_0|\mu|}{\mu_0+|\mu|} \frac{1}{\bar{\varepsilon}} x_{el}(\mu_0, \mu, \varphi_0, \varphi) \frac{1}{\Delta^{3/2}} \Theta(\Delta + E_0 \cdot (k(\theta, M_1, M_2) - 1)). \quad (4.12)$$

Далее в качестве функции $R\left(\frac{z}{l_{el}}, \mu_0, \mu, \varphi_0, \varphi\right)$ воспользуемся решением (2.32). Функцию неупругих потерь энергии ионов $N\left(\frac{z}{l_{in}}, \Delta\right)$ представим в виде $N\left(\frac{z}{l_{in}}, \Delta\right) = \delta(\Delta - \bar{\varepsilon}z)$. Подставим решение (2.32) и функцию $N\left(\frac{z}{l_{in}}, \Delta\right) = \delta(\Delta - \bar{\varepsilon}z)$ в уравнение (4.8):

$$R(\Delta, \mu_0, \mu, \varphi_0, \varphi) = \int_0^\infty \frac{\mu_0|\mu|}{\mu_0+|\mu|} \frac{1}{l_{el}} \sum_{l=0}^\infty \frac{2l+1}{2} P_l(\mu_0\mu + \sqrt{1-\mu_0^2}\sqrt{1-\mu^2} \cos(\varphi_0 - \varphi)) \left[e^{-(1-x_l)\frac{z}{l_{el}}} - e^{-\frac{z}{l_{el}}} \right] \delta(\Delta - \bar{\varepsilon}z) dz. \quad (4.13)$$

В данном случае для получения функции $R(\Delta, \mu_0, \mu, \varphi_0, \varphi)$ необходимо параметр z в уравнении (4.13) заменить на $\frac{\Delta}{\bar{\varepsilon}}$, причем в данном случае $\Delta = E_0 - E$. Перейдем к переменной $\Delta = \frac{E_0 - E}{E_0}$:

$$R(\Delta, \mu_0, \mu, \varphi_0, \varphi) = \frac{\mu_0 |\mu|}{\mu_0 + |\mu|} \frac{1}{\bar{\varepsilon}} \frac{l_{el} \bar{\varepsilon}}{\Delta \cdot E_0} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{2} P_l \left(\mu_0 \mu + \sqrt{1 - \mu_0^2} \sqrt{1 - \mu^2} \cos(\varphi_0 - \varphi) \right) \left(e^{-\frac{(1-x_l) \Delta \cdot E_0}{l_{el} \bar{\varepsilon}}} - e^{-\frac{\Delta \cdot E_0}{l_{el} \bar{\varepsilon}}} \right), \quad (4.14)$$

где $\frac{E_0}{\bar{\varepsilon}} = R_0$ – тормозной путь; $l_{el} = l_{tr}(1 - x_1)$; $\frac{E_0}{l_{tr} \bar{\varepsilon}} = \zeta$ – безразмерный параметр.

С учетом указанных параметров уравнение (4.14) запишется в следующем виде:

$$R(\Delta, \mu_0, \mu, \varphi_0, \varphi) = \frac{\mu_0 |\mu|}{\mu_0 + |\mu|} \frac{1}{\bar{\varepsilon}} \frac{(1-x_1)}{\Delta \cdot \zeta} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{2} P_l \left(\mu_0 \mu + \sqrt{1 - \mu_0^2} \sqrt{1 - \mu^2} \cos(\varphi_0 - \varphi) \right) \left(e^{-\frac{(1-x_l) \Delta \cdot \zeta}{(1-x_1)}} - e^{-\frac{\Delta \cdot \zeta}{(1-x_1)}} \right). \quad (4.15)$$

Итоговая формула с учетом зависимости сечения от энергии выглядит так:

$$R(\Delta, \mu_0, \mu, \varphi_0, \varphi) = \frac{\mu_0 |\mu|}{\mu_0 + |\mu|} \frac{1}{\bar{\varepsilon}} \frac{(1-x_1)(1-\Delta)}{\Delta \cdot \zeta} e^{-\frac{A}{\sqrt{1-\Delta}}} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{2} P_l \left(\mu_0 \mu + \sqrt{1 - \mu_0^2} \sqrt{1 - \mu^2} \cos(\varphi_0 - \varphi) \right) \left(e^{-\frac{(1-x_l) \Delta \cdot \zeta}{(1-x_1)(1-\Delta)^{5/2}}} - e^{-\frac{\Delta \cdot \zeta}{(1-x_1)(1-\Delta)^{5/2}}} \right), \quad (4.16)$$

где $e^{-\frac{A}{\sqrt{1-\Delta}}}$ – множитель, учитывающий перезарядку ионов при отрыве от поверхности мишени; A – подгоночный параметр.

Для сравнения рассчитанных по формуле (4.16) энергетических спектров с экспериментальными данными необходимо решение (4.16) свернуть с функцией Гаусса, учитывающей возможные уширения пучка ионов:

$$F(\Delta) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_{\Sigma}} e^{-\frac{\Delta^2}{2\sigma_{\Sigma}^2}}, \quad (4.17)$$

где $\sigma_{\Sigma} = \overline{\varepsilon^2 \tau} + \sigma_{Dop} + \sigma_{beam} + \sigma_{enan}$ – суммарный уширяющий фактор; $\overline{\varepsilon^2 \tau}$ – страгглинг; σ_{Dop} – уширение за счет эффекта Доплера; σ_{beam} – уширение, возникающее за счет энергетического разброса в зондирующем пучке; σ_{enan} – аппаратная функция энергоанализатора.

4.3 Угловые распределения отраженных легких ионов

Для определения распределения отраженных легких ионов по углам вылета из мишени необходимо проинтегрировать распределение отраженных легких ионов по длине пробега (2.32) по всем возможным длинам траектории – от $\tau = 0$ до $\tau = R_0$, где $R_0 = \int_0^{E_0} dE / \bar{\varepsilon}(E)$ – остаточный пробег иона или тормозной путь; $\bar{\varepsilon}(E)$ – средние потери энергии иона на единице длины; E_0 – начальная энергия иона. Таким образом, получим выражение для углового распределения отраженных ионов:

$$R(\mu_0, \mu, \varphi_0, \varphi) = \int_0^{R_0} R\left(z/l_{el}, \mu_0, \mu, \varphi_0, \varphi\right) dz =$$

$$\frac{\mu_0|\mu|}{\mu_0+|\mu|} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{2} \frac{1}{s \cdot l_{el}} P_l\left(\mu_0\mu + \sqrt{1-\mu_0^2}\sqrt{1-\mu^2} \cos(\varphi_0 - \varphi)\right) \left[e^{-s(1-x^l)} - e^{-s}\right] = \frac{\mu_0|\mu|}{\mu_0+|\mu|} e^{-\frac{A}{|\mu|}} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{2} P_l\left(\mu_0\mu + \sqrt{1-\mu_0^2}\sqrt{1-\mu^2} \cos(\varphi_0 - \varphi)\right) S_l, \quad (4.18)$$

где $S_l = \text{Ei}(-(1-x_l)\xi) - \text{Ei}(-\xi) - \ln(1-x_l)$ при $l > 0$; $S_0 = C + \ln(\xi)$; $C = 0.5772$ – постоянная Эйлера; Ei – интегральная экспонента; $\xi = R_0 / l_{el}$; функция $\exp(-A / |\mu|)$ учитывает перезарядку иона при отрыве от поверхности мишени (если рассматривается суммарный по зарядовым фракциям состав отраженных ионов, то данный процесс не учитывается); A – подгоночный параметр, величина которого порядка единицы.

Отметим, что безразмерная величина $\xi = \sigma^* / (1-x_1) = R_0 / l_{el} \gg 1$; $\frac{E_0}{l_{tr}\bar{\varepsilon}} = \sigma^*$. При энергии протонов $E_0 = 1$ кэВ величина $\xi = 2.21 \cdot 10^6$ для вольфрама; $\xi = 4.656 \cdot 10^4$ для бериллия. С ростом начальной энергии протонов величина ξ заметно меняется, оставаясь большой, например, для энергии $E_0 = 50$ кэВ $\xi = 8.481 \cdot 10^4$ для вольфрама; $\xi = 882.413$ для бериллия. Данное обстоятельство упрощает приведенные выше формулы: $S_l = \text{Ei}(-(1-x_l) / (1-x_1) \sigma^*) - \ln(1-x_l)$ при $l > 0$; $S_0 = C + \ln(\sigma^* / (1-x_1))$.

4.4 Интегральные характеристики отражения легких ионов

Для определения коэффициента отражения частиц $R_N(\mu_0)$ необходимо проинтегрировать угловое распределение (4.18) по всем углам вылета ионов из мишени, что приводит к формуле:

$$R_N(\mu_0) = 1/\mu_0 \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{-1} R(\mu_0, \mu, \varphi_0, \varphi) d\mu = \sum_l S_l \cdot C_l(\mu_0) \cdot P_l(\mu_0), \quad (4.19)$$

где $C_l(\mu_0) = \pi \cdot (2l + 1) \int_0^{-1} |\mu| / (|\mu| + \mu_0) \cdot P_l(\mu) d\mu$.

Коэффициент отражения энергии определяется согласно следующей формуле:

$$R_E(\mu_0) = 1/(\mu_0 \cdot E_0) \int_0^{R_0} ds \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{-1} R(s, \mu_0, \mu, \varphi_0, \varphi) \cdot \bar{\epsilon} \cdot s \cdot d\mu. \quad (4.20)$$

Подставив в уравнение (4.20) уравнение (2.32), получим выражение для определения коэффициента отражения энергии:

$$R_E(\mu_0) = C_0(\mu_0)(1 - \zeta^{-1}) + \sum_{l=1}^{\infty} C_l(\mu_0) \cdot P_l(\mu_0) \cdot 1/\zeta \left[1/(1 - x^l) \left\{ 1 - \exp(-\zeta(1 - x^l)) \right\} - 1 \right], \quad (4.21)$$

где $\zeta = R_0/l_{el}$.

4.5 Результаты расчета интегральных и дифференциальных характеристик рассеяния

Аналитическая теоретическая модель отражения легких ионов от твердых тел, построенная в данной работе, базируется на методах решения граничной задачи для уравнения упругого переноса, разработанного и апробированного при решении задач отражения электронов от твердых тел. Эти методы основаны на решении граничных задач для уравнения упругого переноса методом инвариантного погружения в малоугловом приближении. Справедливость применения малоуглового приближения к задачам ионного рассеяния основывается на сильной вытянутости сечения упругого рассеяния ионов. Так как в настоящее время не существует апробированных данных по сечению

упругого рассеяния ионов, специалисты в данной области используют модельные сечения упругого рассеяния. Таковым является, например, сечение упругого рассеяния Резерфорда, полученное на основе экранированного кулоновского потенциала в первом Борновском приближении:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{Ze^2}{16\pi\epsilon_0 E_0} \right)^2 \frac{1}{\left(\sin^2 \frac{\theta}{2} + \delta^2 \right)^2}, \quad (4.22)$$

где Z – заряд мишени; e – заряд электрона; ϵ_0 – диэлектрическая проницаемость; E_0 – начальная энергия зондирующих ионов; θ – угол рассеяния; δ – параметр экранирования.

Специалисты, занимающиеся моделированием процессов взаимодействия ионов с твердым телом, вместо сечений упругого рассеяния ионов используют различные виды потенциалов атомов, соответствующих двух частичному взаимодействию [119]:

$$U(R) = \frac{Ze}{4\pi\epsilon_0 R} \Phi\left(\frac{R}{a}\right), \quad (4.23)$$

где $\Phi\left(\frac{R}{a}\right)$ – функция экранирования, определяемая функцией распределения электронов, связанных с ядром; a – дебаевский радиус плазмы твердого тела или радиус атома-рассеивателя.

В настоящее время существует большое количество функций экранирования $\Phi\left(\frac{R}{a}\right)$:

функция Линдхарда:

$$\Phi(R/a) = \frac{R/a}{\left(3+(R/a)^2\right)^{1/2}}, \quad (4.24)$$

функция Мольер:

$$\Phi(R/a) = 0.35 \cdot e^{-0.3 \cdot R/a} + 0.55 \cdot e^{-0.5 \cdot R/a} + 0.1 \cdot e^{-6 \cdot R/a}, \quad (4.25)$$

функция Ленца-Йенсена:

$$\Phi(R/a) = 0.7466 \cdot e^{-1.038 \cdot R/a} + 0.2433 \cdot e^{-0.3876 \cdot R/a} + 0.01018 \cdot e^{-0.206 \cdot R/a}, \quad (4.26)$$

функция Вилсона-Хагтмарка-Бирзака (Kr-C):

$$\Phi(R/a) = 0.191 \cdot e^{-0.279 \cdot R/a} + 0.474 \cdot e^{-0.637 \cdot R/a} + 0.355 \cdot e^{-1.919 \cdot R/a}, \quad (4.27)$$

функция Циглера, Бирзака и Литтмарка (ZBL):

$$\Phi(R/a) = 0.1818 \cdot e^{-3.2 \cdot R/a} + 0.5099 \cdot e^{-0.9423 \cdot R/a} + 0.2802 \cdot e^{-0.4029 \cdot R/a} + 0.02817 \cdot e^{-0.2016 \cdot R/a}. \quad (4.28)$$

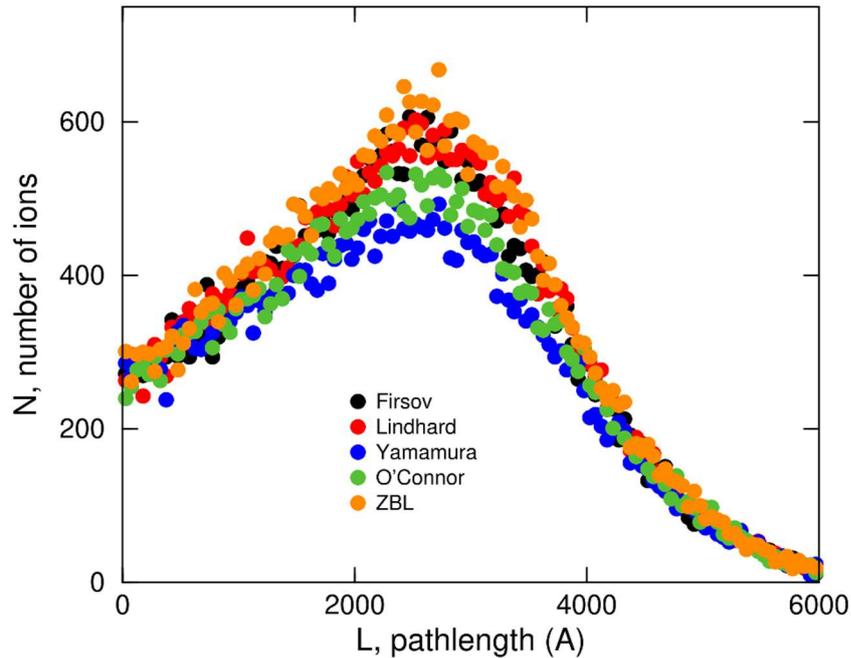


Рисунок 4.3 – Распределение отраженных протонов по длине пробега для различных потенциалов взаимодействия

Как показано на рис. 4.3 точность описания ионного рассеяния слабо зависит от выбора потенциала, на основе которого получают сечение упругого рассеяния ионов. В данной работе в качестве сечения упругого рассеяния используется сечение, полученное на основе потенциала Kr-C (4.27). Радиус экранирования рассчитывается по формуле Фирсова:

$$a_{\Phi} = 0.8853 a_0 \left(Z_1^{1/2} + Z_2^{1/2} \right)^{-2/3}, \quad (4.29)$$

где a_0 – первый борновский радиус; Z_1 – заряд атомов мишени; Z_2 – заряд иона.

Как было указано во введении к четвертой главе в настоящее время для описания процесса взаимодействия ионов с твердым телом используется приближение прямолинейных траекторий. Рассмотрим одну из многочисленных работ [120], в которой авторы пытаются описать энергетические распределения отраженных протонов на основе этого приближения.

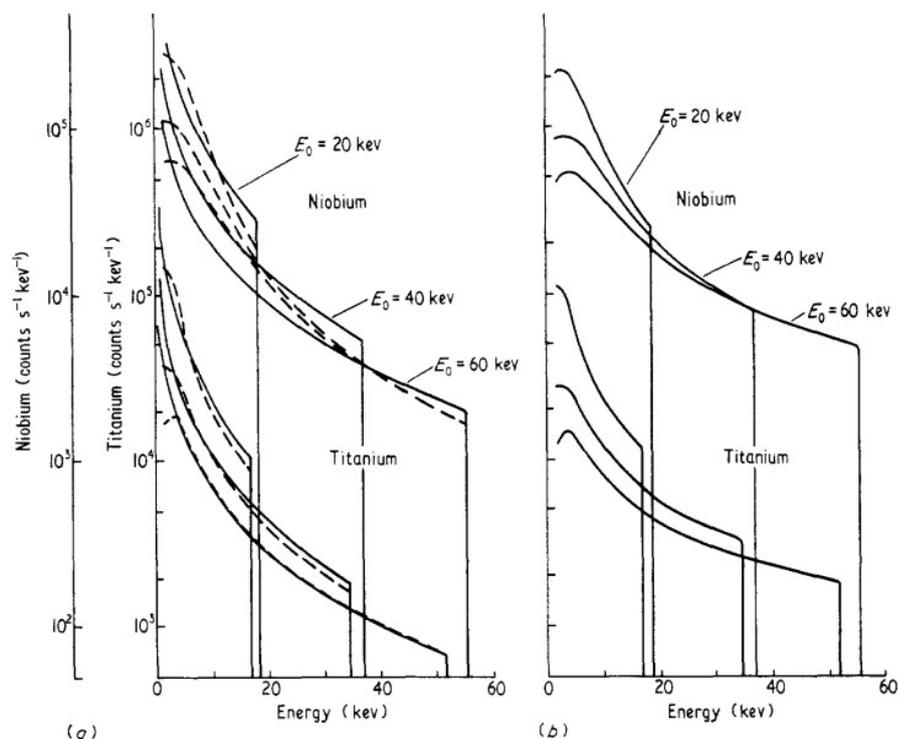


Рисунок 4.4 – Энергетические спектры отраженных протонов [120]

Из рис. 4.4 видно вполне удовлетворительное соответствие расчетов результатам эксперимента. Однако, масштаб по оси ординат выбран логарифмический, что значит, что при различии данных в 10 раз, различий на графике заметно не будет. Возможно, авторы данной работы намеренно использовали логарифмический масштаб с целью скрыть очевидные расхождения.

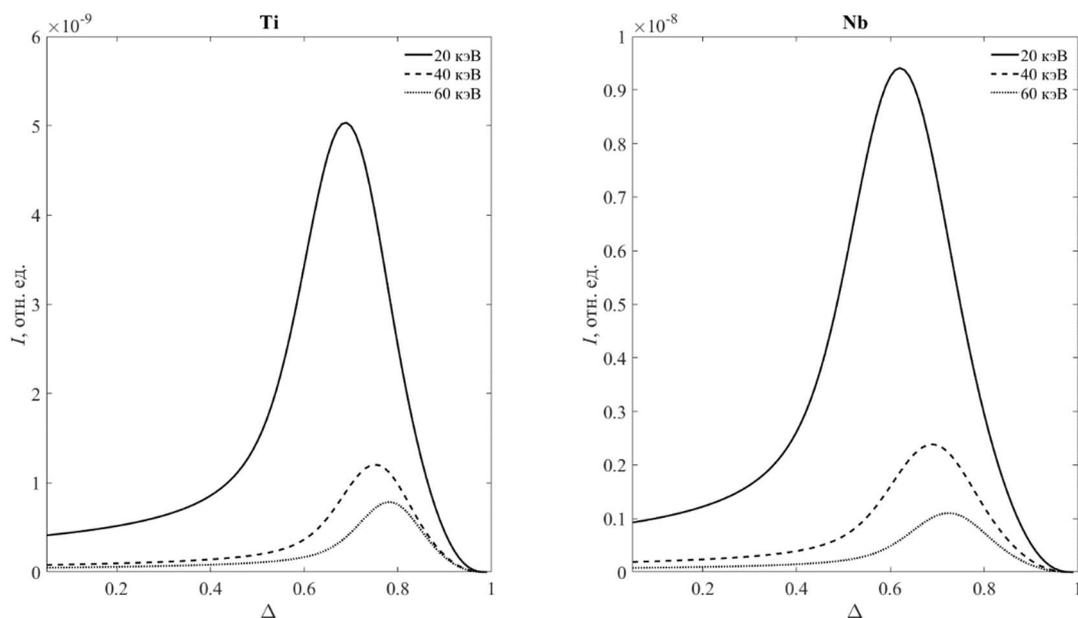


Рисунок 4.5 – Энергетические спектры отраженных протонов, посчитанные по формуле (4.16). Интерпретация эксперимента [120]

На рис. 4.5 представлены расчеты энергетических распределений отраженных протонов, полученные в результате расчета по методике, развитой в настоящей работе (уравнение (4.16)), интерпретирующие экспериментальные данные работы [120]. Видно, что вид энергетического спектра далек от того вида, что получается при расчете в приближении прямолинейных траекторий. Энергетические распределения, получаемые по формуле (4.16), качественно удовлетворяют всем особенностям поведения энергетических распределений, указанных в [3].

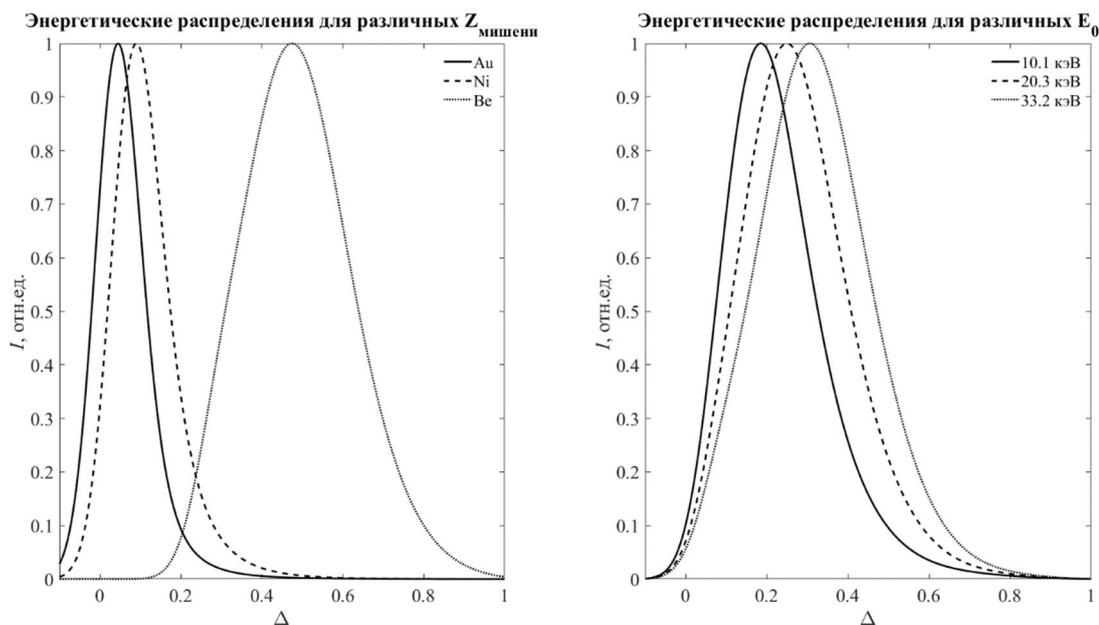


Рисунок 4.6 – Энергетические спектры протонов, отраженных от мишеней с различным зарядовым номером (левая картинка), начальная энергия протонов $E_0 = 10$ кэВ, угол падения 83° , угол отражения 95° ; энергетические спектры отраженных от медной мишени протонов с различной начальной энергией (правая картинка), угол падения 80° , угол отражения 110°

Рис. 4.6 демонстрирует, что уменьшение атомного номера материала мишени приводит к возрастанию полуширины энергетического распределения и сдвигу максимума распределения с сторону больших потерь энергии; при увеличении энергии зондирующих частиц наблюдается сдвиг максимума распределения в область больших потерь энергий и увеличение полуширины распределения.

Итак, описание экспериментальных энергетических распределений отраженных легких ионов с помощью приближения прямолинейных траекторий в области средних энергий зондирующих ионов, неприменимо, а методика, развитая в настоящей работе, дает удовлетворительное качественное описание экспериментальных данных.

При создании количественной методики описания электронного рассеяния в XX веке Бронштейном и Прониным [93] были проведены эксперименты по угловым распределениям упруго отраженных электронов, максимально точно описывающим сечение упругого рассеяния электронов. Таким образом были апробированы данные по сечениям упругого рассеяния электронов, которые в настоящее время указаны в данных НИСТ.

Автор данной работы считает, что для апробации разработанной в настоящей работе методики решения задачи упругого рассеяния ионов необходимо сперва выверить данные по сечению упругого рассеяния легких ионов.

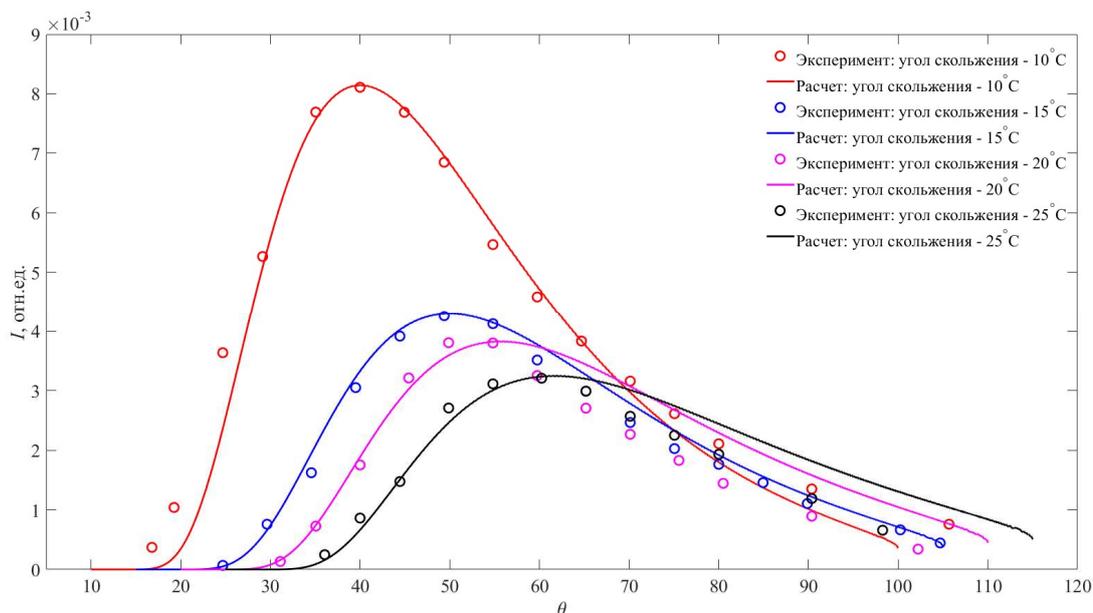


Рисунок 4.7 – Угловые распределения отраженных от медной мишени протонов. Начальная энергия протонов $E_0 = 21.6$ кэВ. Расчет – формула (4.18), эксперимент [121]

На рис. 4.7 представлены результаты сравнения расчетов угловых распределений отраженных протонов, посчитанные по разработанной в данной работе методике (формула (4.18)), с экспериментальными данными [121]. Для количественного совпадения результатов проведена корректировка величины

параметра экранирования ионов. Параметр экранирования является определяющим параметром при определении сечения упругого рассеяния ионов. Таким образом, следует вывод, что представленная в данной работе методика описания угловых распределений отраженных ионов справедлива, однако, данные по сечению упругого рассеяния ионов, используемые при расчете, могут иметь неточность, определяющую расхождение результатов расчета с экспериментальными данными.

На рис. 4.7 представлена интерпретация экспериментальных данных, подразумевающая учет процесса перезарядки протонов, что значительно усложняет процесс количественного описания в связи с тем, что помимо корректировки параметра экранирования (т.е. сечения упругого рассеяния) необходимо корректировать параметр перезарядки A . Рассмотрим более простые с точки зрения интерпретации экспериментальные результаты угловых распределений суммарной по зарядовому составу плотности потока отраженных протонов.

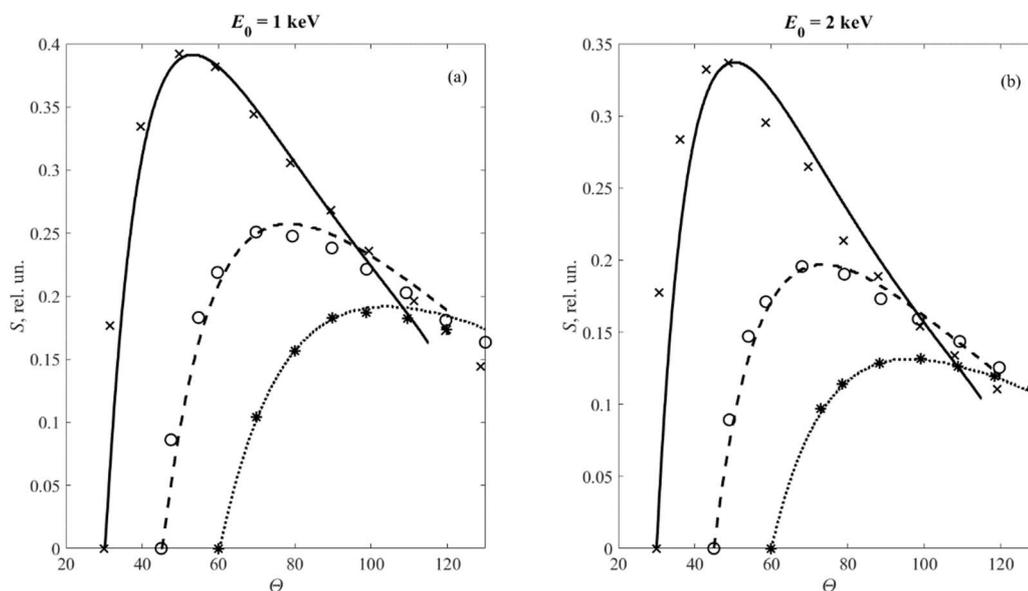


Рисунок 4.8 – Угловые распределения протонов, отраженных от графита. Угол падения 30° , 45° , 60° . Линии – расчет на основе формулы (4.18); эксперимент –

[3]

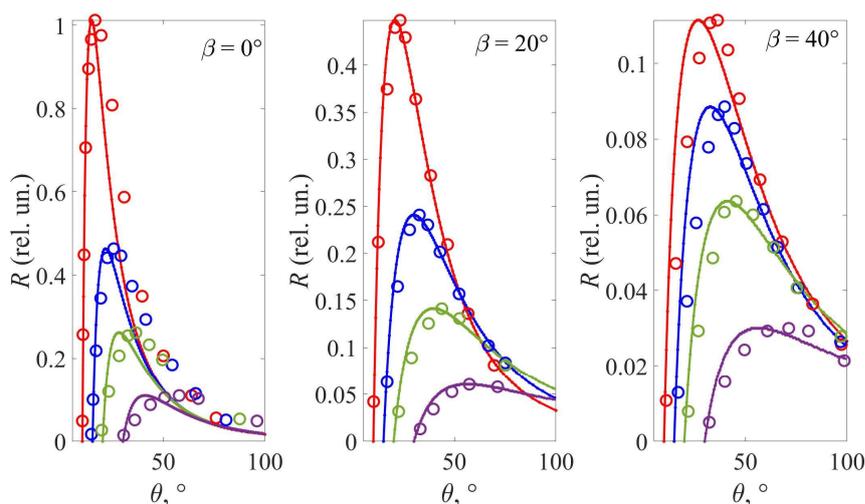


Рисунок 4.9 – Угловые распределения протонов, отраженных от Ni. $E_0 = 20$ кэВ. $\beta = \text{tg}(\varphi)\cos(\theta - \alpha)$ – угол отклонения от плоскости падения, где φ – азимутальный угол; θ – полярный угол рассеяния; α – полярный угол скольжения. $\alpha = 10^\circ$ – красная линия; $\alpha = 15^\circ$ – синяя линия; $\alpha = 20^\circ$ – зеленая линия; $\alpha = 30^\circ$ – фиолетовая линия. Сплошные линии – расчет на основе формулы (4.18), символы – эксперимент [122]

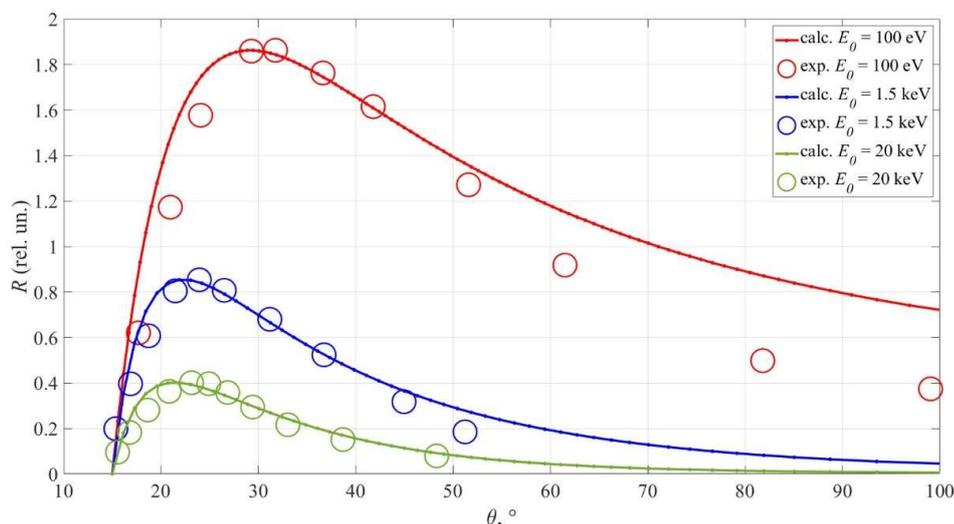


Рисунок 4.10 – Угловые распределения дейтронов, отраженных от W. Угол падения 75° . $E_0 = 100$ эВ (красная линия и кружки); $E_0 = 1.5$ кэВ (синяя линия и кружки); $E_0 = 20$ кэВ (зеленая линия и кружки). Линии – расчет на основе формулы (4.18); кружки – эксперимент [123]

Результаты расчета угловых распределений суммарной по зарядовому составу плотности потока протонов (рис. 4.8, 4.9) и дейтонов (рис. 4.10) по представленной аналитической методике (решение (4.18)) демонстрируют абсолютно верное качественное и удовлетворительное количественное описание экспериментальных данных для широкого диапазона энергий зондирующего потока и различной геометрии рассеяния. Количественного совпадения удалось достичь путем вариации двух физически обоснованных параметров, определяющих процессы рассеяния частиц в твердом теле – параметр экранирования и средние потери энергии легких ионов на единицу длины пути.

Далее рассмотрим решение неупругой задачи рассеяния ионов.

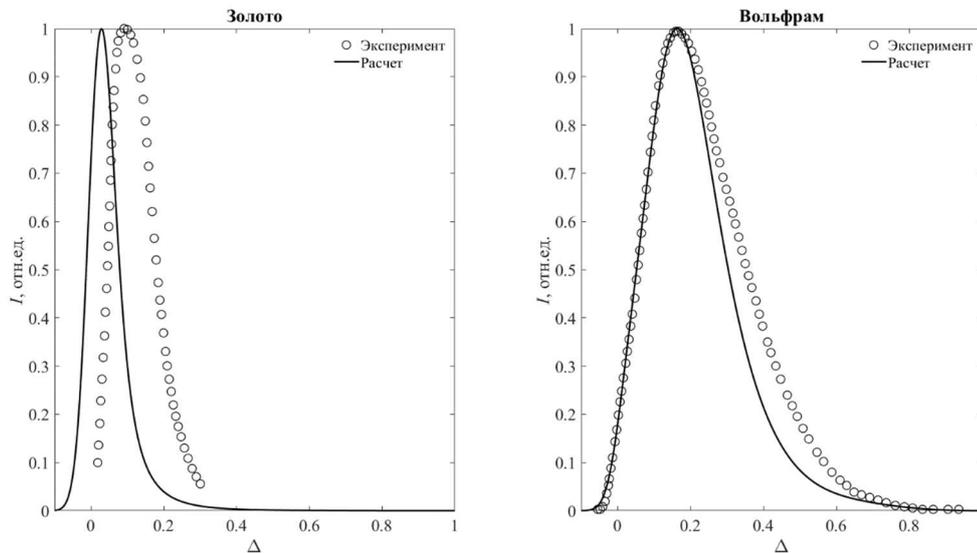


Рисунок 4.11 – Энергетические спектры отраженных протонов. Левая картинка: начальная энергия протонов $E_0 = 10$ кэВ, угол падения 83° , угол отражения 95° , эксперимент [3]. Правая картинка: начальная энергия протонов $E_0 = 25$ кэВ, угол падения 71° , угол отражения 109° , эксперимент [124]

На рис. 4.11 представлены результаты сравнения расчетов по разработанной в данной работе методике (формула (4.16)) с экспериментальными данными. Рис. 4.11 демонстрирует удовлетворительное качественное соответствие результатов сравнения, однако, количественное совпадение не наблюдается. К тому же,

максимум расчетного распределения для вольфрамовой мишени, совпадает с максимумом экспериментального распределения, а максимум расчетного распределения для мишени из золота не совпадает с максимумом экспериментального распределения. Данный факт не поддается логическому объяснению, т.к. решение упругой задачи для золота и вольфрама практически идентично, что связано с тем, что зарядовые числа золота и вольфрама практически одинаковы, а сечение упругого рассеяния определяется именно квадратом зарядового числа (формула (4.22)).

Таким образом, следует вывод, что различие связано с решением неупругой задачи. Приближение Фоккера-Планка, используемое для описания неупругих потерь энергии ионов, основано на первых двух моментах сечения неупругого рассеяния – средние потери энергии ионов на единице длины и средний квадрат потерь энергии ионов на единице длины.

Т.к. данных по среднему квадрату потерь энергии ионов не существует, то эта величина является подгоночным параметром. Т.е. положение энергетического распределения определяется в основном величиной средних потерь энергии ионов на единицы длины.

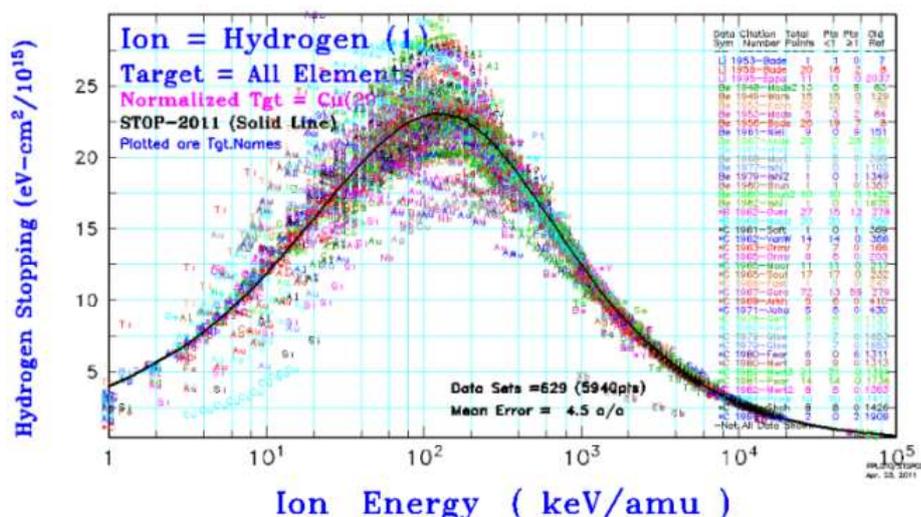


Рисунок 4.12 – Существующие в настоящее время данные по средним потерям энергии протонов на единице длины [125]

Как показано на рис. 4.12 в настоящее время эта величина для многих элементов известна с погрешностью, достигающей сотни процентов. К тому же, для энергий зондирующих протонов, находящихся в интервале $0 < E_0 < 100$ кэВ, величина средних потерь энергии пропорциональна корню из энергии $\bar{\epsilon} \sim \sqrt{E}$, т.е. растет с увеличением энергии. Приближение Фоккера-Планка основано на модели Томсона, в которой средние потери энергии убывают с ростом энергии $\bar{\epsilon} \sim \frac{1}{E}$, что справедливо для энергий $E_0 > 100$ кэВ. Поэтому приближение Фоккера-Планка для количественного описания неупругих потерь энергии ионов средних энергий не может быть использовано.

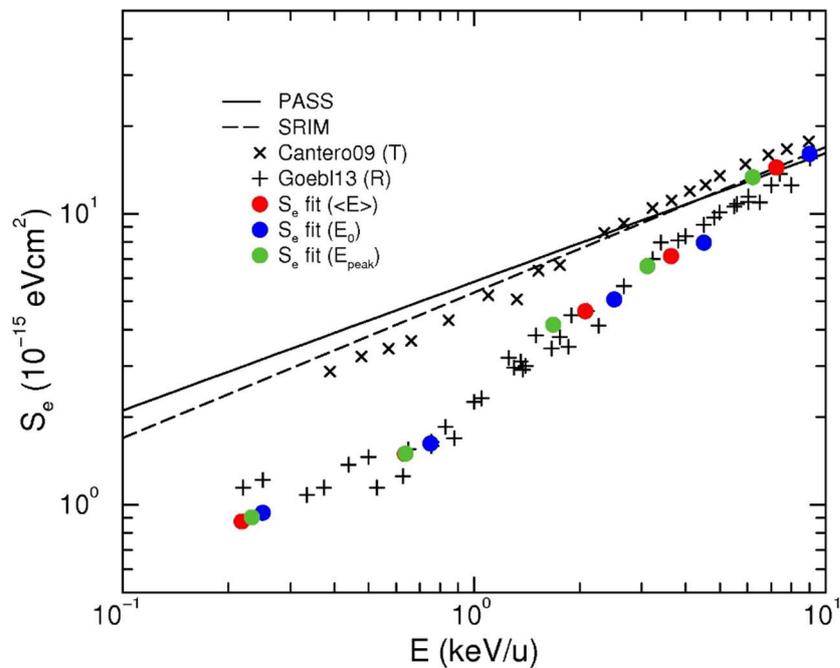


Рисунок 4.13 – Величина средних потерь энергии протонов на единице длины [126,127]

На рис. 4.13 показаны значения средних потерь энергии протонов на единице длины, полученные двумя различными методами: с помощью экспериментов на отражение и экспериментов на пропускание. Эти данные были получены различными научными группами [126,127]. Рис. 4.13 указывает на то, что, используя различные методы определения данной величины, результаты

получаются отличными друг от друга, что говорит о некорректности методик, по которым отыскиваются данные величины средних потерь энергии ионов.

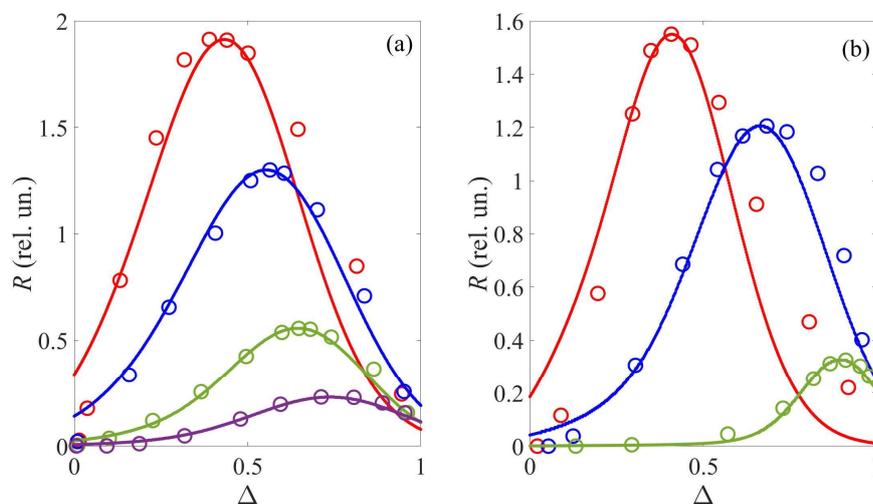


Рисунок 4.14 – Энергетические спектры протонов, отраженных от графитовой мишени. (а): для различной энергии зондирующих протонов (бордовая линия – 5 кэВ; синяя линия – 10 кэВ; зеленая линия – 20 кэВ; оранжевая линия – 30 кэВ); угол падения 85° , угол рассеяния 15° . (б): для различных углов рассеяния (бордовая линия – 8.5° ; синяя линия – 20° ; зеленая линия – 30°); угол падения 85° ; начальная энергия протонов 15 кэВ. Линии – расчет на основе формулы (4.16), кружки – эксперимент [122]

Результаты расчета на рис. 4.14 (а) отражают все характерные особенности поведения энергетических спектров отраженных легких ионов средних энергий, а именно: с увеличением энергии резко снижается интенсивность пика, что определяется энергетической зависимостью дифференциального сечения упругого рассеяния, происходит сдвиг максимума распределения в сторону больших потерь энергии, растет ширина распределения на полувысоте. С увеличением угла рассеяния (рис. 4.14 (б)) снижается интенсивность пика; происходит сдвиг максимума распределения в область больших потерь энергии и уширение пика. Те же особенности поведения энергетических распределений указаны в [3].

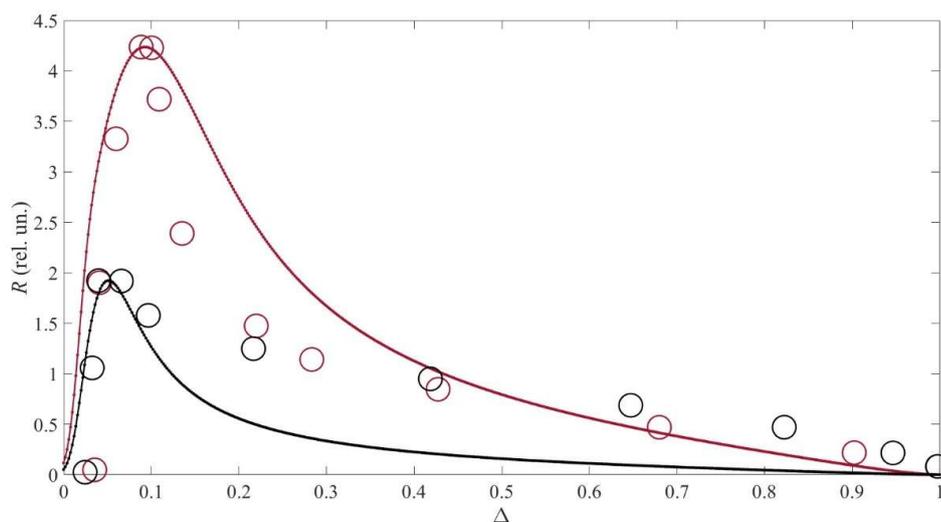


Рисунок 4.15 – Энергетические спектры протонов, отраженных от вольфрама. Падение по нормали к поверхности; угол рассеяния 135° . $E_0 = 100$ эВ (бордовая линия и кружки); $E_0 = 500$ эВ (черная линия и кружки). Кружки – моделирование, линии – расчет на основе формулы (4.16)

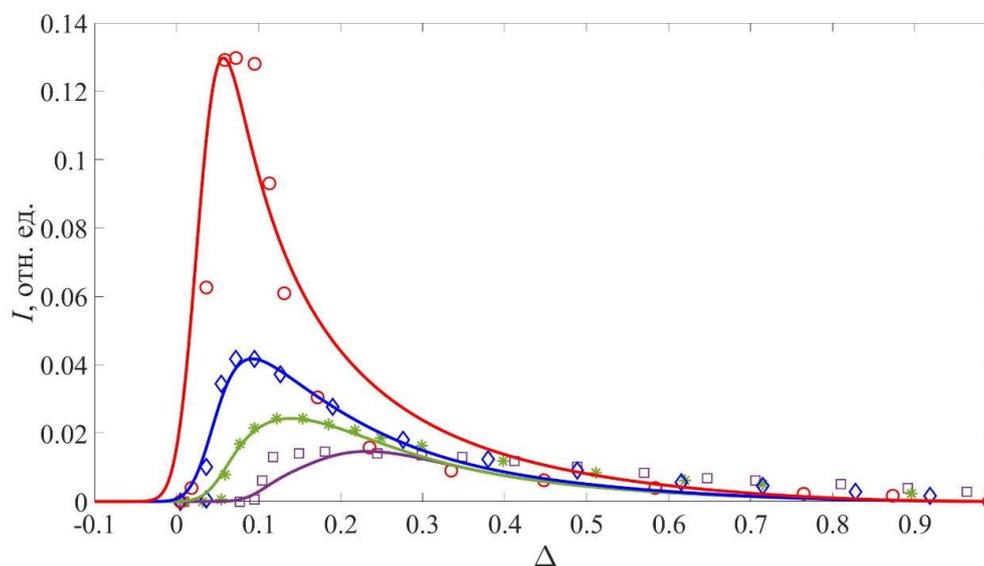


Рисунок 4.16 – Дифференциальные по энергии спектры дейтонов, отраженных от Ni. Начальная энергия $E_0 = 300$ эВ. Угол визирования $\theta_0 = 0^\circ$ (фиолетовая линия; квадратики), 45° (зеленая линия; звездочки), 60° (синяя линия; ромбики), 75° (красная линия; кружки). Линии – расчет на основе формулы (4.16); значки – данные компьютерного моделирования [121]

Рис. (4.14) – (4.16) демонстрируют абсолютно верное качественное описание энергетических спектров протонов и дейтонов, отраженных от графитовых, никелиевых и вольфрамовых мишеней с энергией от сотен эВ до десятков кэВ. Подчеркнем, что ни одна из существующих аналитических теорий не способна даже качественно верно описать характеристики рассеяния легких ионов в твердом теле. Созданная теория позволяет получить не только верное качественное описание, но также добиться количественного совпадения результатов путем изменения двух физически обоснованных параметров – параметра экранирования, являющегося основой определения сечения упругого рассеяния, и средних потерь энергии легких ионов.

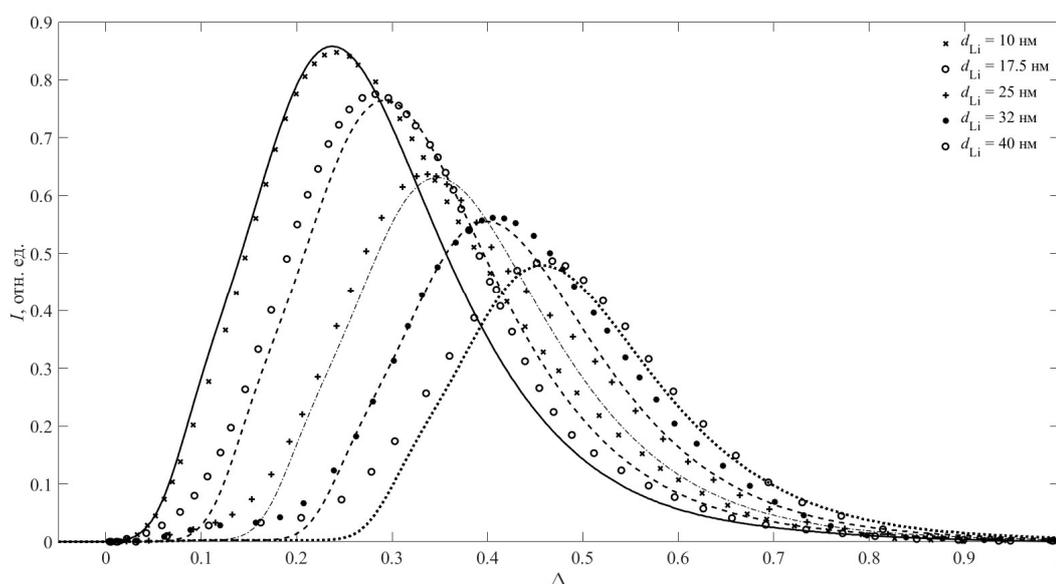


Рисунок 4.17 – Энергетические спектры протонов, отраженных от вольфрама со слоями напыленного лития. Начальная энергия протонов $E_0 = 25$ кэВ. Угол падения 71° , угол отражения 109° . Линии – расчет на основе формул (4.16) и (3.18) и методики, представленной в пункте 3.3; символы – эксперимент [128]

На рис. 4.17 представлены результаты сравнения энергетических спектров протонов, отраженных от мишени из вольфрама со слоями лития различной толщины. Аналитическая методика анализа слоисто-неоднородных мишеней

представлена в пункте 3.3 главы 3. Рис. 4.17 демонстрирует удовлетворительное описание экспериментальных данных по методике, развитой в настоящей работе. Энергетический сдвиг энергетического спектра вольфрама с слоем лития определяется величиной $-\bar{\epsilon}d$, где $\bar{\epsilon}$ – средние потери энергии протонов на единице длины для лития, d – толщина слоя лития. Таким образом, разработанная методика может стать надежным инструментом для верификации значения средних потерь энергии ионов на единице длины, если известны толщины исследуемых покрытий и наоборот, зная величину средних потерь энергии ионов на единице длины, можно определить толщину исследуемого покрытия.

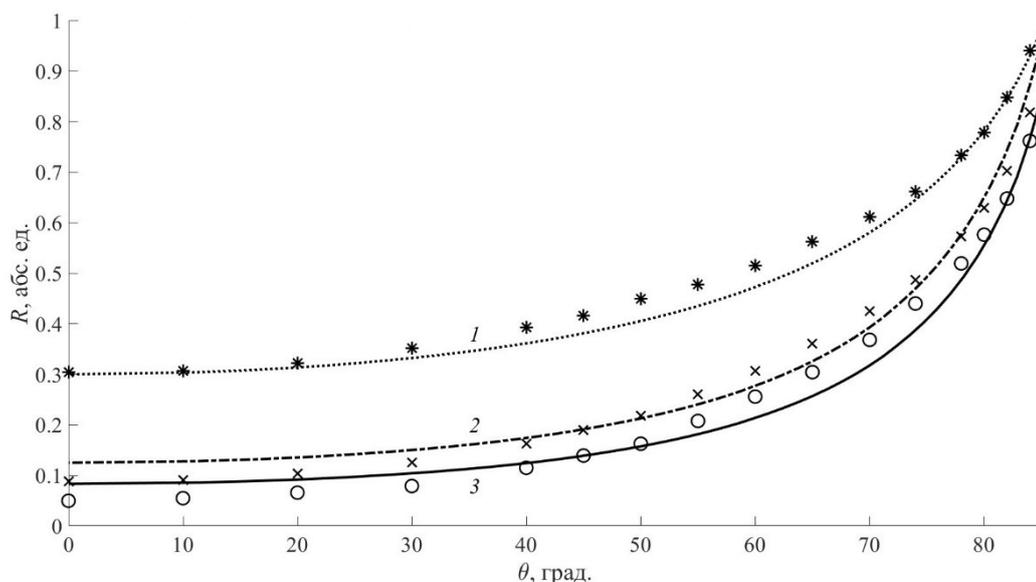


Рисунок 4.18 – Коэффициенты отражения частиц R_N как функция угла падения пучка протонов. Начальная энергия протонов $E_0 = 1$ кэВ. (1) – медь; (2) – углерод; (3) – бериллий. Линии – расчет на основе формулы (4.19); символы – моделирование [129]

Расчеты коэффициентов отражения частиц, представленные на рис. 4.18, удовлетворительно согласуются с результатами моделирования. Моделирование было выполнено для аморфной мишени с помощью программы OKSANA по

методике, подробно изложенной в работе [129]. При аналитическом расчете величины $R_N(\mu_0)$ для углов скольжения $\theta_0 \rightarrow 90^\circ$ в формуле для определения величины $C_l(\mu_0)$ возникает логарифмическая расходимость. По этой причине для графиков на рис. 4.18 область углов зондирования $\theta_0 \rightarrow 90^\circ$ не представлена.

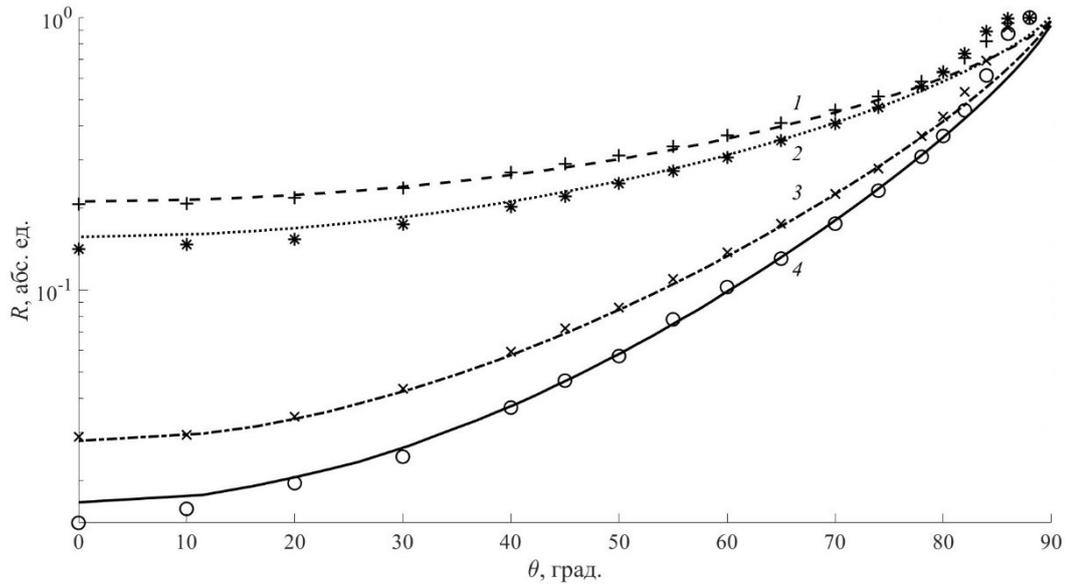


Рисунок 4.19 – Коэффициенты отражения энергии R_E как функция угла падения пучка протонов. Начальная энергия протонов $E_0 = 1$ кэВ. (1) – вольфрам; (2) – медь; (3) – углерод; (4) – бериллий. Линии – расчет на основе формулы (4.21); символы – моделирование [129]

Аналитические расчеты коэффициентов отражения энергии, представленные на рисунке 4.19, показывают плавное, без перегибов стремление к единице при $\theta_0 \rightarrow 90^\circ$, в то время как результаты моделирования указывают на существование плато – $R_E(\mu_0) = 1$ при $\theta_0 \rightarrow 90^\circ$. Для углов зондирования $\theta_0 < 83^\circ$ наблюдается хорошее соответствие расчетов. Отметим, что в экспериментах [130] измерения коэффициентов отражения энергии ограничивались углами падения, не превышающими 78° .

Интегральные характеристики рассеяния легких ионов в твердом теле имеют важную роль при описании процесса рециклинга энергии в установках УТС.

Рассмотрим ситуацию, в которой экспериментальные энергетические распределения отраженных электронов описываются в приближении Фоккера-Планка.

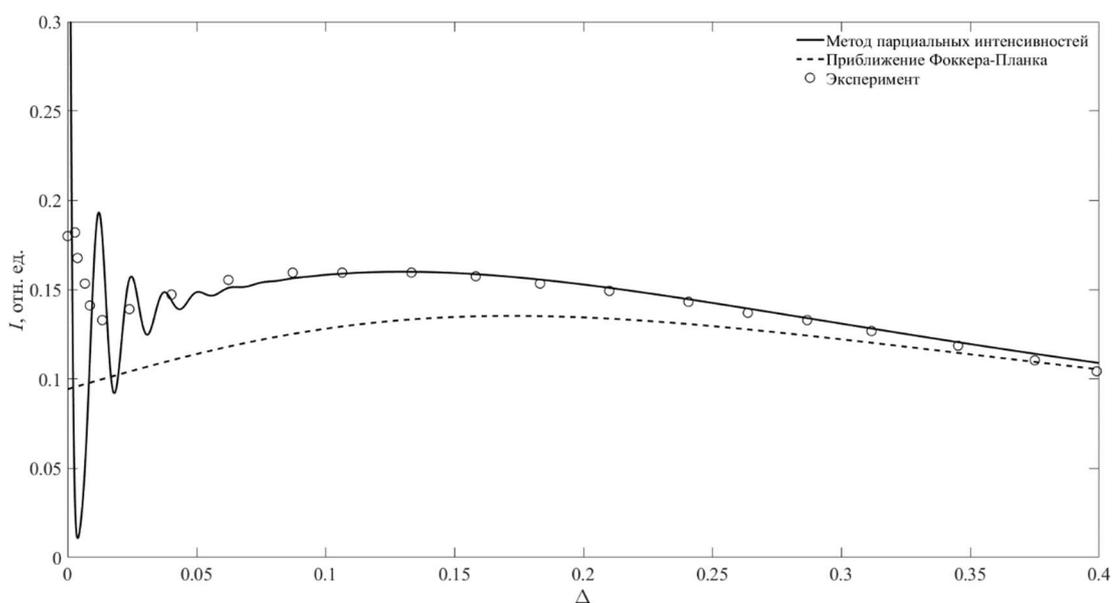


Рисунок 4.20 – Энергетические распределения электронов, отраженных от медной мишени. Начальная энергия электронов $E_0 = 8$ кэВ. Нормальное падение, отражение на 135° . Эксперимент – [27]

Из рис. 4.20 видно, что результаты расчета в приближении Фоккера-Планка далеки от вида реального энергетического распределения отраженных электронов, полученных из эксперимента, несмотря на то, что величина средних потерь энергии электронов на единице длины в рассматриваемом интервале энергий убывает с ростом энергии $\bar{\epsilon} \sim \frac{1}{E}$, что в какой-то степени удовлетворяет модели сечения неупругого рассеяния, которая является основой для применения приближения Фоккера-Планка. Данные по средним потерям

энергии электронов можно найти в базе данных НИСТ. Однако, методикой, с удовлетворительной точностью описывающей экспериментальные данные, является методика, основанная на знании сечения неупругого рассеяния электронов (решение Ландау (3.7)).

Не удивительно, что при интерпретации энергетических распределений отраженных ионов, для которых величина средних потерь энергии на единицу длины растет с ростом энергии, в приближении Фоккера-Планка, основывающемся на знании только первого момента сечения неупругого рассеяния, получается сильное расхождение.

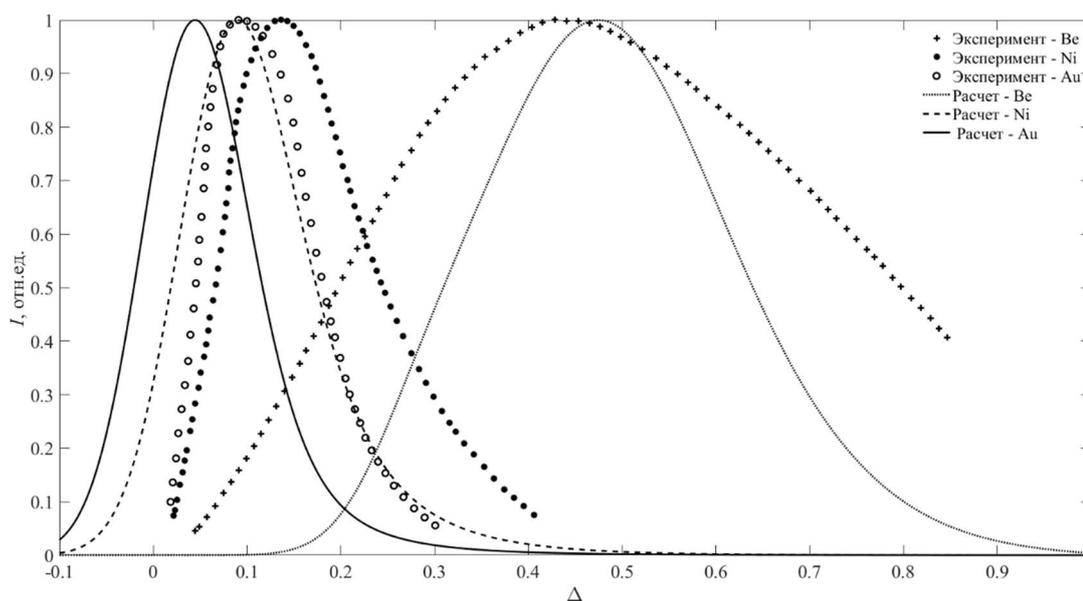


Рисунок 4.21 – Энергетические спектры отраженных протонов. Начальная энергия протонов $E_0 = 10$ кэВ. Угол падения 83° , угол отражения 95° .

Эксперимент [3]

Однако, стоит отметить, что, несмотря на невозможность количественного описания энергетических распределений отраженных ионов в приближении Фоккера-Планка, наблюдается абсолютно верное качественное описание. Автор данной работы считает, что качественное соответствие получено благодаря разработанной в данной работе методике решения задачи упругого рассеяния

ионов. Для решения неупругой задачи рассеяния ионов средних энергий приближение Фоккера-Планка неприменимо. Следует ожидать удовлетворительное количественное описание энергетических распределений отраженных ионов при использовании теории Ландау, где определяющим параметром, описывающим неупругие потери ионов, будет сечение неупругого рассеяния ионов.

4.6 Основные результаты и выводы четвертой главы

Создана аналитическая теоретическая модель описания процессов отражения легких ионов от поверхности твердых тел. Теоретическая модель базируется на решении граничной задачи для уравнения упругого переноса, описывающем распределение отраженных легких ионов по длине пробега, многократно и успешно апробированным в задачах электронного рассеяния. Данное решение строится в рамках метода инвариантного погружения Амбарцумяна в малоугловом приближении. Показано, что используемая методика применима в задачах ионного рассеяния. Отмечено, в задачах рассеяния легких ионов данную методику можно использовать в интервале энергий от сотни эВ до десятков кэВ.

Существующие аналитические подходы описания отражения легких ионов от твердых тел подразумевают различное теоретическое описание в случае детектирования ионов под скользящими углами или под углами, близкими к нормали к поверхности. Различные методы необходимо использовать и для описания отражения при различных энергиях зондирующего пучка ионов. Представленный в работе метод позволяет описывать все отмеченные ситуации в рамках единого решения.

В рамках созданной аналитической теоретической модели угловые и энергетические спектры, коэффициенты отражения энергии и частиц определяются двумя физически обоснованными параметрами – безразмерным

параметром $\zeta = \frac{E_0}{l_{tr}\bar{\epsilon}}$ и параметром экранирования η , определяющим дифференциальное сечение упругого рассеяния ω_{el} . Для большинства элементов величина средних потерь энергии на единице длины $\bar{\epsilon}$ известна с погрешностью, превышающую сотни процентов [8]. Базируясь на выверенном на основе сравнения с результатами компьютерного моделирования решении задачи упругого рассеяния, было получено удовлетворительное количественное совпадение расчетных и экспериментальных данных путем вариации величины $\bar{\epsilon}$ в пределах разброса данных, представленных в литературе.

Показано, что энергетические спектры и угловые распределения отраженных протонов и дейтонов, описанные в рамках представленного подхода, имеют все качественные особенности поведения при изменении атомного номера мишени и при изменении энергии зондирующего пучка, описанные в [3].

Основным недостатком созданной методики является использование приближения Фоккера-Планка для описания процессов многократных неупругих потерь энергии легких ионов в области энергий от сотен эВ до десятков кэВ. Использование указанного приближения вызвано отсутствием данных по дифференциальному сечению неупругого рассеяния легких ионов в твердых телах. В литературе доступна лишь информация о первом моменте сечения неупругого рассеяния $\bar{\epsilon}$. Приближение Фоккера-Планка справедливо, если дифференциальное сечение неупругого рассеяния имеет резкий максимум в области малых потерь энергии, что имеет место в случае, когда энергия легких ионов превышает сотни кэВ на нуклон, когда $\bar{\epsilon}$ описывается формулой Бете-Блоха, а сечение неупругого рассеяния описывается формулой Томсона. Для энергий ионов от сотен эВ до десятков кэВ $\bar{\epsilon}$ описывается формулой Линдхарда, которую можно получить на основе сечения, имеющего профиль Лоренца, что нарушает условия применимости приближения Фоккера-Планка. Для описания

спектров ионов в указанной ситуации возможно использование метода парциальных интенсивностей.

Глава 5. Количественная методика расшифровки сигнала рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии

Метод рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии (РФЭС) базируется на явлении фотоэлектронной эмиссии. Поверхность исследуемого образца облучается фотонами с характеристической энергией. Удобный источник характеристического рентгеновского излучения может быть создан на основе электронной бомбардировки мишеней, например, Mg и Al. Энергия характеристического рентгеновского излучения, испускаемого при релаксации K_{α} линии Mg равна 1253.64 эВ; K_{α} линии Al равна 1486.65 эВ. В результате возбуждения атомов исследуемого материала рентгеновским излучением рождаются фотоэлектроны, энергия которых определяется законом Эйнштейна – $E_{f-e} = E_{x-ray} - A_{вых}$. Компонентный анализ поверхности материала строится на основе измерения энергетических спектров испускаемых материалом фотоэлектронов. Каждый пик в энергетическом спектре соответствует определенному атому материала, т.к. энергия фотоэлектронов однозначно определяется разностью энергии рентгеновского излучения и энергии связи электрона в данном элементе.

5.1 Традиционный РФЭС анализ - Peak Shape Analysis

Традиционный метод анализа материалов на основе РФЭС – метод расшифровки фотоэлектронных пиков или Peak Shape Analysis (PSA) [14,99]. Данный метод основывается на анализе формы и определении интенсивности фотоэлектронных пиков, т.е. пиков фотоэлектронов, не потерявших энергию в результате неупругого взаимодействия. При анализе экспериментальных РФЭС спектров в рамках PSA подходом необходимым действием является вычитание неупругого фона, образованного фотоэлектронами, многократно испытавшими неупругое рассеяние. Существует множество методов вычитания неупругого

фона, основными из которых являются линейный метод, метод Ширли и метод Тугаарда [131,132].

После выполнения процедуры вычитания неупругого фона необходимо описать интенсивность фотоэлектронных пиков. Методика описания интенсивностей строится следующим образом.

Плотность потока фотоэлектронов $Q(x, \Delta, \mu_0, \mu, \varphi_0, \varphi)$, излученных в направлении $\Omega(\theta, \varphi)$, где $\theta = \arccos(\mu)$ – полярный угол, φ – азимутальный угол, слоем толщиной x , и вышедших в вакуум с потерей энергии, равной Δ , определяется формулой:

$$dQ(x, \Delta, \mu_0, \mu, \varphi_0, \varphi) = n_0(x) F(\mu_0, \mu, \varphi_0, \varphi) N\left(\frac{x}{\mu}, \Delta\right) dx, \quad (5.1)$$

где $n_0(x)$ – концентрация атомов, фото эмиссия которых регистрируется; плотность потока зондирующего рентгеновского излучения, падающего на образец под углом $\Omega_0(\theta_0, \varphi_0)$, где $\theta_0 = \arccos(\mu_0)$, принята равной единице; $F(\mu_0, \mu, \varphi_0, \varphi)$ – функция фото эмиссии, определяемая сечением фоторождения $\sigma_{x \rightarrow e}$; $N(x/\mu, \Delta)$ – функция Ландау, определяющая распределение по потерям энергии Δ фотоэлектронов, прошедших путь x/μ при их движении к поверхности образца.

Функция фото эмиссии определяется согласно следующей формуле:

$$F(\mu_0, \mu, \varphi_0, \varphi) = \frac{\sigma_{x \rightarrow e}}{4\pi} \sum_{i=0}^3 B_i P_i(\psi),$$

$$B_0 = 1, \quad (5.2)$$

$$\cos(\psi) = \mu\mu_0 - \sqrt{(1 - \mu^2)(1 - \mu_0^2)} \cos(\varphi_0 - \varphi),$$

где $P_i(\psi)$ – полиномы Лежандра; ψ – угол между направлением рентгеновского излучения и направлением вылета фотоэлектронов из мишени.

Если следовать результатам [133,134], то:

$$F(\mu_0, \mu, \varphi_0, \varphi) = \frac{\sigma_{x \rightarrow e}}{4\pi} \left[P_0(\psi) + \left(\delta + \frac{\gamma}{5} \right) P_1(\psi) - \frac{\beta}{2} P_2(\psi) - \frac{\gamma}{5} P_3(\psi) \right]. \quad (5.3)$$

Формула (5.3) определяет величины коэффициентов B_i в формуле (5.2), при этом коэффициенты δ и γ обычно полагаются равными нулю.

$$N\left(\frac{x}{\mu}, \Delta\right) = e^{-\frac{x}{\mu l_{in}}} \left[\delta(\Delta) + \frac{\frac{x}{\mu l_{in}}}{1!} x_{in}(\Delta) + \dots + \frac{\left(\frac{x}{\mu l_{in}}\right)^k}{k!} x_{in}^k(\Delta) + \dots \right], \quad (5.4)$$

где l_{in} – длина свободного неупругого пробега электронов; $x_{in}(\Delta)$ – нормированное на единицу дифференциальное сечение неупругих потерь энергии электронов; $x_{in}^k(\Delta)$ – вероятность потери электроном энергии Δ за k -неупругих столкновений.

Энергетический спектр фотоэлектронов, вышедших в вакуум из мишени толщиной x_0 , определяется выражением:

$$Q(x_0, \Delta, \mu_0, \mu, \varphi_0, \varphi) = \int_0^{x_0} n_0(x) F(\mu_0, \mu, \varphi_0, \varphi) N\left(\frac{x}{\mu}, \Delta\right) dx. \quad (5.5)$$

Формула (5.5) является основным вычислительным инструментом РФЭС [135]. Наибольший интерес представляет РФЭС пиков фото эмиссии, сформированных электронами, с которыми в процессе движения в мишени не произошли неупругие столкновения, т.е. электронами, не теряющими свою энергию. Это приближение описывает основной подход в РФЭС – Peak Shape Analysis. Для этого в формуле (5.5) ограничимся первым слагаемым (5.4):

$$Q(x_0, \Delta, \mu_0, \mu, \varphi_0, \varphi) = F(\mu_0, \mu, \varphi_0, \varphi) \int_0^{x_0} n_0(x) e^{-\frac{x}{\mu l_{in}}} dx. \quad (5.6)$$

Если концентрация исследуемого компонента не меняется с глубиной, т.е. $n_0(x) = \text{const}$, то формула (5.6) принимает вид:

$$Q(x_0, \Delta, \mu_0, \mu, \varphi_0, \varphi) = F(\mu_0, \mu, \varphi_0, \varphi) n_0 \mu l_{in} \left(1 - e^{-\frac{x_0}{\mu l_{in}}}\right). \quad (5.7)$$

PSA метод считается основным методом анализа РФЭС спектров [14]. Данный метод реализован в ряде программных продуктов, в том числе CasaXPS [100]. Глубина анализа PSA подхода ограничена средней длиной свободного неупругого пробега фотоэлектронов, составляющей в среднем несколько нм, таким образом, РФЭС метод считается методом анализа поверхности и самой приповерхностной области мишени. PSA метод позволяет проводить качественный и количественный компонентный анализ поверхности мишени

(рис. 5.1) и химический анализ по химическим сдвигам фотоэлектронных пиков (рис. 5.2).

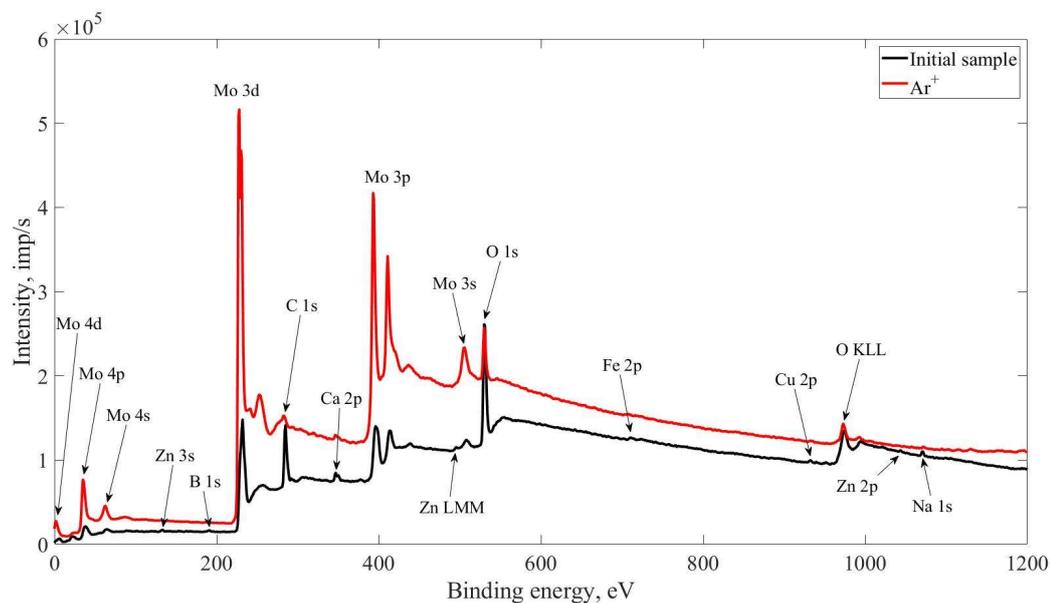


Рисунок 5.1 – Обзорный РФЭС спектр поверхности молибденового «первого зеркала»

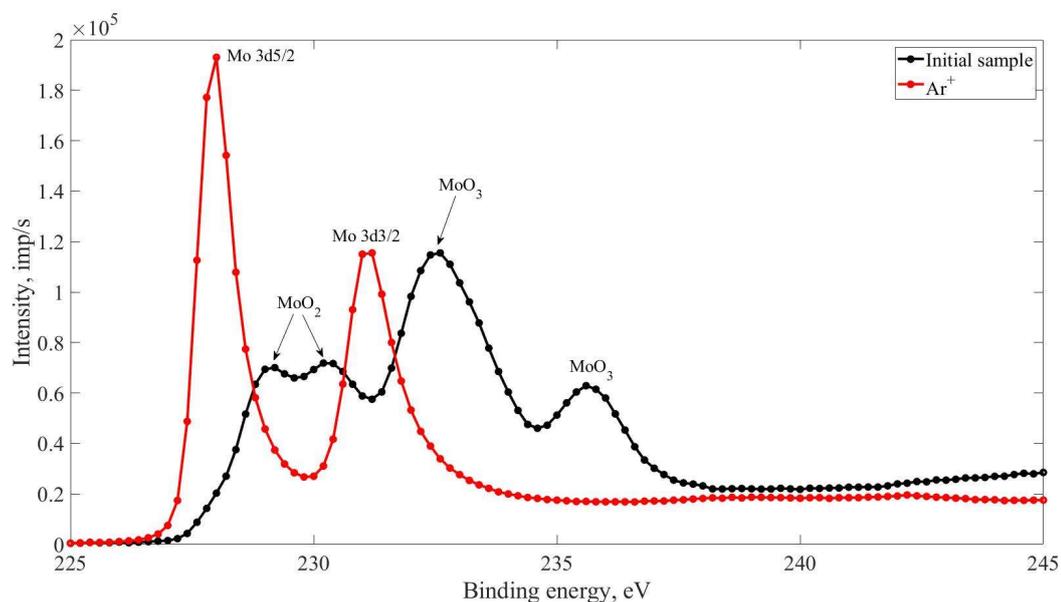


Рисунок 5.2 – РФЭС спектр 3d линии молибдена, снятый с высоким разрешением

Несостоятельность PSA метода для определения относительных концентраций компонент многокомпонентной мишени продемонстрировал Тугард [15], показав на примере определения относительных концентраций

меди и золота, что различные конфигурации распределения атомов Cu в и на поверхности золотой подложки приводят к идентичной интенсивности РФЭС пика (рис. 5.3).

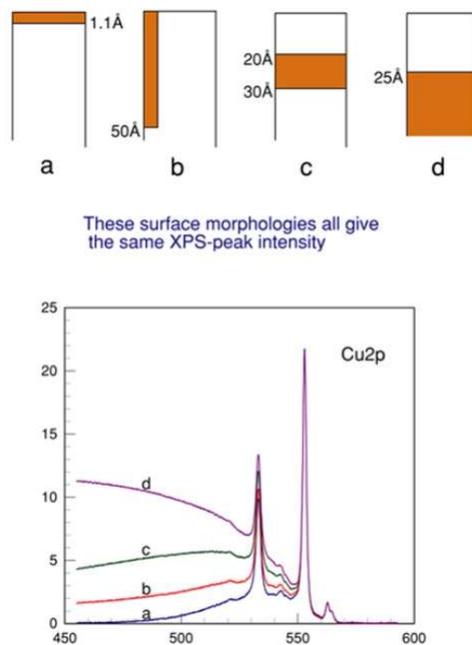


Рисунок 5.3 – Демонстрация несостоятельности PSA метода

Интенсивность рассмотренных пиков одинакова, но ситуации, в которых они сформировались, различны, можно предложить множество и других способов получить аналогичную картину. Различить представленные случаи можно, проанализировав область потерь энергии фотоэлектронов, которая, как показано на рис. 5.3, различная для всех ситуаций. Метод, основанный на анализе не только фотоэлектронных пиков, но и на области потерь энергии фотоэлектронов, называется Photo Electron Spectra analysis (PES analysis). С одной стороны, для реализации PES анализа необходимо иметь данные по дифференциальным сечениям неупругого рассеяния электронов $x_{in}(E_0, \Delta)$. С другой стороны, PES анализ является надежным инструментом для восстановления дифференциального сечения неупругого рассеяния электронов (что является обратной задачей, некорректной с математической точки зрения)

на основе процедуры подбора – многократного решения прямой задачи с целью поиска наилучшего совпадения расчетных и экспериментальных данных.

Дифференциальное по энергии сечение неупругого рассеяния электронов является центральным понятием количественной электронной спектроскопии. Основными механизмами потерь энергии электронов в твердом теле являются локальные потери энергии на ионизацию и межзонные переходы, описываемые сечением x_{ion} , и нелокальные потери энергии на возбуждение ленгмюровских (плазменных) колебаний [136,137], описываемые сечением x_{pl} . В связи с этим дифференциальное сечение неупругого рассеяния допускает представление в виде:

$$x_{in}(\Delta) = \sum_{i=1}^{N_{pl}} \lambda_{pl i} x_{pl i}(\Delta) + \sum_{j=1}^{N_{ion}} \lambda_{ion j} x_{ion j}(\Delta), \quad (5.8)$$

где коэффициенты $\lambda_{pl i}$ и $\lambda_{ion j}$ показывают вклад соответствующих процессов и соответствуют условию: $\sum_{i=1}^{N_{pl}} \lambda_{pl i} + \sum_{j=1}^{N_{ion}} \lambda_{ion j} = 1$.

Дифференциальное сечение неупругого рассеяния электронов на возбуждение плазменных колебаний является мнимой частью диэлектрической проницаемости [138,139] рассматриваемого материала и однозначно определяет не только сам материал, но и его аллотропную форму:

$$\omega_{pl}(E_0, \Delta) = \frac{1}{E_0} \int_{K^-}^{K^+} \text{Im} \left\{ -\frac{1}{\varepsilon(k, \Delta)} \right\} \frac{dk}{k}, \quad (5.9)$$

где k – передаваемый от электрона импульс; $\varepsilon(k, \Delta)$ – диэлектрическая проницаемость среды.

Для расчета нормированного дифференциального сечения однократного неупругого рассеяния электронов на возбуждение плазменных колебаний $x_{pl}(\Delta)$ используется подход, основанный на теории Друде-Лоренца [137,140]:

$$x_{pl}(\Delta) = n l_{in} \sum_{i=1}^N \int \frac{\sqrt{2m/\hbar^2}(\sqrt{E} + \sqrt{E-\Delta})}{\sqrt{2m/\hbar^2}(\sqrt{E} - \sqrt{E-\Delta})} \frac{A_i \hbar \gamma_i \Delta}{\left[\left(\hbar \omega_{oi} + \alpha_i \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \right) - \Delta^2 \right]^2 + \Delta^2 \hbar^2 \gamma_i^2} \frac{dk}{k}, \quad (5.10)$$

где n – концентрация атомов мишени; m – масса электрона; \hbar – постоянная Планка; A_i – амплитуда плазмонного возбуждения; $\hbar \gamma_i$ – ширина плазмонного

возбуждения; $\hbar\omega_{0i}$ – энергия плазмонного возбуждения; α_i – дисперсия; $\hbar k$ – импульс электрона.

Сечение ионизации описывается формулой Томсона [141] с учётом экранирования:

$$x_{ion j}(\Delta) = \frac{A_{ion j}}{\Delta^{2+a_j}} \eta(\Delta - J_{ion j}), \quad (5.11)$$

где $J_{ion j}$ – порог ионизации; a_j – параметр экранирования; $\eta(\Delta - J_{ion j})$ – ступенчатая функция Хевисайда; коэффициенты $A_{ion j}$ определяются из условия нормировки $\int_0^{E_0} x_{ion j}(\Delta) d\Delta = 1$.

Таким образом, данная глава посвящена созданию количественной методики расшифровки РФЭС спектров с помощью PES анализа и применению разработанной методики для однозначного определения аллотропной разновидности исследуемого материала на реальных примерах конструкционных материалов современных токамаков [A5, A10, A11, A12].

5.2 Построение методики PES анализа. Решение граничной задачи с внутренними источниками

Введем сферическую систему координат, ось x которой направлена из мишени, оси z и y лежат на ее поверхности. Рассмотрим полубесконечную мишень, на которую падает рентгеновское излучение. Допустим, что источники фотоэлектронов расположены в мишени однородно. Пусть n_0 и n – направления влета рентгеновского излучения и вылета фотоэлектрона из мишени соответственно, μ_0 и μ – косинусы полярного угла θ влета рентгеновского излучения и вылета фотоэлектрона соответственно, φ – азимутальный угол. Пусть мишень освещается потоком рентгеновского излучения сверху. Нормаль к слою (ось x), от которой отсчитывается полярный угол, направлена вверх, перпендикулярно слою.

Введем функцию $Q(x, \mu_0, \mu, \varphi)$ – плотность потока фотоэлектронов, вылетающих из мишени под углом μ к нормали x , направленной в направлении

из мишени в вакуум нормально к поверхности. Решение граничной задачи для уравнения упругого переноса найдем методом инвариантного погружения. Добавим сверху полубесконечного слоя полоску из того же материала толщиной dx , причем $dx \ll l_{el}$. Дополнительные процессы, возникающие в результате появления полоски dx над слоем x , представлены на рис. 5.4.

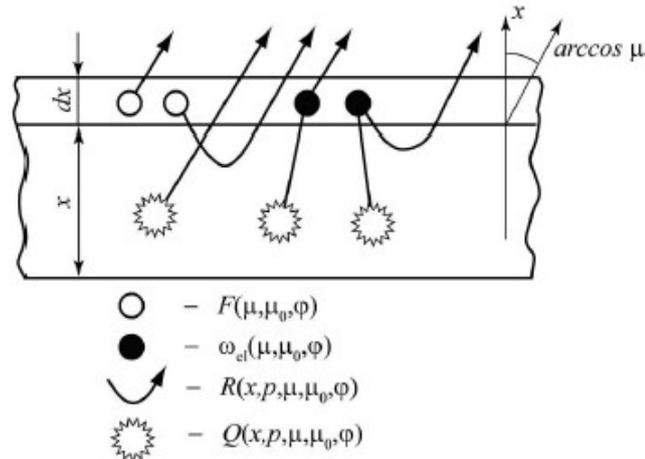


Рисунок 5.4 – Процессы, возникающие за счет добавления слоя dx

Здесь $F(\mu_0, \mu, \varphi)$ – элементарная функция фотоэмиссии; $\omega_{el}(\mu_0, \mu, \varphi)$ – дифференциальное сечение упругого рассеяния электронов; $R(x, \mu_0, \mu, \varphi)$ – функция отражения.

Пусть функция $Q(s, \mu_0, \mu, \varphi)$ – распределение фотоэлектронов, излучаемых в направлении (μ, φ) по длинам пробега в мишени s , где $s = x/l_{el}$. Принимая во внимание, что $ds = dx/\mu$, приходим к уравнению:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\mu} \frac{\partial}{\partial s} Q(s, \mu_0, \mu, \varphi) + \frac{1}{\mu} Q(s, \mu_0, \mu, \varphi) &= \frac{\sigma_{x \rightarrow e}}{\sigma_{el}} F(\mu_0, \mu, \varphi) \delta(s) + \\ &+ \frac{\sigma_{x \rightarrow e}}{\sigma_{el}} \int_0^{2\pi} \int_0^1 F(\mu_0, \mu', \varphi - \varphi') R(s, \mu', \varphi', \mu) \frac{d\mu'}{\mu'} d\varphi' + \\ &+ \int_0^{2\pi} \int_{-1}^0 Q(s, \mu_0, \mu', \varphi - \varphi') x_{el}(\mu', \mu, \varphi') \frac{d\mu'}{\mu'} d\varphi' + \\ &+ \int_0^\infty ds' \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^1 Q(s - s', \mu_0, \mu', \varphi') \int_{-1}^0 x_{el}(\mu', \mu'', \varphi'' - \\ & - \varphi') R(s', \mu'', \mu, \varphi'' - \varphi) \frac{d\mu'}{\mu'} d\varphi' \frac{d\mu''}{\mu''} d\varphi'', \end{aligned} \quad (5.12)$$

где $Q(s, \mu_0, \mu, \varphi)$ – плотность потока фотоэлектронов; $s = x/l_{el}$ – пробег фотоэлектронов в мишени; x – глубина в мишени; l_{el} – средняя длина свободного упругого пробега; μ_0, μ – косинус полярного угла между направлением зондирования рентгеновским излучением и нормалью к поверхности и направлением вылета фотоэлектронов и нормалью к поверхности соответственно; φ – азимутальный угол; $F(\mu_0, \mu, \varphi) = (\sigma_{x \rightarrow e}/4\pi)[1 - (\beta/4)(3\cos^2\theta - 1)] = (\sigma_{x \rightarrow e}/4\pi)[1 - (\beta/2)P_2(\cos\theta)]$ – элементарная функция фотоэмиссии; $\sigma_{x \rightarrow e}$ – сечение фотоэмиссии; β – параметр асимметрии сечения фотоэмиссии; θ – полярный угол между направлением падения рентгеновского излучения и направлением вылета фотоэлектронов; $\cos(\theta) = \mu_1 = \mu_0\mu + (1-\mu_0)^{1/2}(1-\mu)^{1/2}$; $P_l(\cos(\theta))$ – полиномы Лежандра; $R(s, \mu_0, \mu, \varphi)$ – функция отражения; $x_{el}(\mu_0, \mu, \varphi)$ – нормированное на единицу дифференциальное сечение упругого рассеяния электронов; δ – дельта функция.

Решение уравнения (5.12) определим в малоугловом приближении, которое справедливо благодаря «сильной вытянутости» сечения упругого рассеяния:

$$x_{el}(0) \gg x_{el}(90). \quad (5.13)$$

Условие (5.13) позволяет упростить уравнение (5.12), сведя его к виду:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\mu} \frac{\partial}{\partial s} Q(s, \mu_0, \mu, \varphi) + \frac{1}{\mu} Q(s, \mu_0, \mu, \varphi) &= \frac{\sigma_{x \rightarrow e}}{\sigma_{el}} F(\mu_0, \mu, \varphi) \delta(s) + \\ \frac{1}{\mu} \int_0^{2\pi} \int_{-1}^1 Q(s, \mu_0, \mu', \varphi - \varphi') x_{el}(\mu', \mu, \varphi') d\mu' d\varphi' - \\ \frac{1}{\mu} \int_0^{2\pi} \int_0^1 Q(s, \mu_0, \mu', \varphi - \varphi') x_{el}(\mu', \mu, \varphi') d\mu' d\varphi', \end{aligned} \quad (5.14)$$

где σ_{el} – полное сечение упругого рассеяния электронов.

Последнее слагаемое в уравнении (5.14) вычисляется, если представить сечение $x_{el}(\mu, \varphi, \mu', \varphi')$ в транспортном приближении [142,143]:

$$x_{el}(\mu', \varphi', \mu, \varphi) = \frac{\xi \sigma_{tr}}{2\sigma_{el}} + \left(1 - \frac{\xi \sigma_{tr}}{\sigma_{el}}\right) \delta(\mu' - \mu) \delta(\varphi' - \varphi), \quad (5.15)$$

где σ_{tr} – транспортное сечение.

Параметр $\xi \leq 1$ корректирует формулу (5.15), учитывая особенности дифференциального сечения упругого рассеяния фотоэлектронов с энергиями

меньше или порядка 1 кэВ. $\xi = 1$ в случае сечения Резерфорда для энергий электронов, превосходящих десятки кэВ.

Уравнение (5.14) решим, представив плотность потока фотоэлектронов $Q(s, \mu_0, \mu, \varphi)$ и нормированное дифференциальное сечение упругого рассеяния $x_{el}(\mu, \varphi, \mu', \varphi')$ в виде разложения в ряд по сферическим функциям:

$$\begin{aligned} Q(s, \mu, \varphi) &= \sum_{l,m=0}^{\infty} Q_l(s) Y_{lm}(\mu, \varphi), \\ x_{el}(\mu', \varphi', \mu, \varphi) &= \sum_{l,m=0}^{\infty} x_l Y_{lm}(\mu, \varphi) Y_{lm}(\mu', \varphi'), \end{aligned} \quad (5.16)$$

где $Q_l(s)$, x_l – коэффициенты разложения функций $Q(s, \mu_0, \mu, \varphi)$, $x_{el}(\mu, \varphi, \mu', \varphi')$ в ряд по сферическим функциям Y_{lm} соответственно.

Таким образом, для коэффициентов $Q_l(s)$ получаем:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial s} Q_0(s) + \frac{\xi l_{el}}{2l_{tr}} Q_0(s) &= \mu \frac{\sigma_{x \rightarrow e}}{2} \delta(s), \\ \frac{\partial}{\partial s} Q_2(s) + (1 - x_2) Q_2(s) &= \mu \frac{\sigma_{x \rightarrow e}}{2} \frac{\beta}{2} \delta(s). \end{aligned} \quad (5.17)$$

Решив полученную систему уравнений (5.17), получаем распределение фотоэлектронов по длине пробега в мишени:

$$Q(s_{tr}, \mu, \mu_1) = \mu \frac{\sigma_{x \rightarrow e}}{2} \left[\exp\left(-\frac{\xi s_{tr}}{4}\right) - \frac{\beta}{4} \exp\left(-\frac{(1-x_2)}{(1-x_1)} s_{tr}\right) (3\mu_1^2 - 1) \right], \quad (5.18)$$

где $s_{tr} = s/l_{tr}$ – пробег в мишени, выраженный в длинах транспортного пробега l_{tr} .

Результаты расчета распределения фотоэлектронов по длине пробега, полученные по формуле (5.18) для различных мишеней, с удовлетворительной точностью описывают результаты компьютерного моделирования, представленные в работе [16,144] (рис. 5.5).

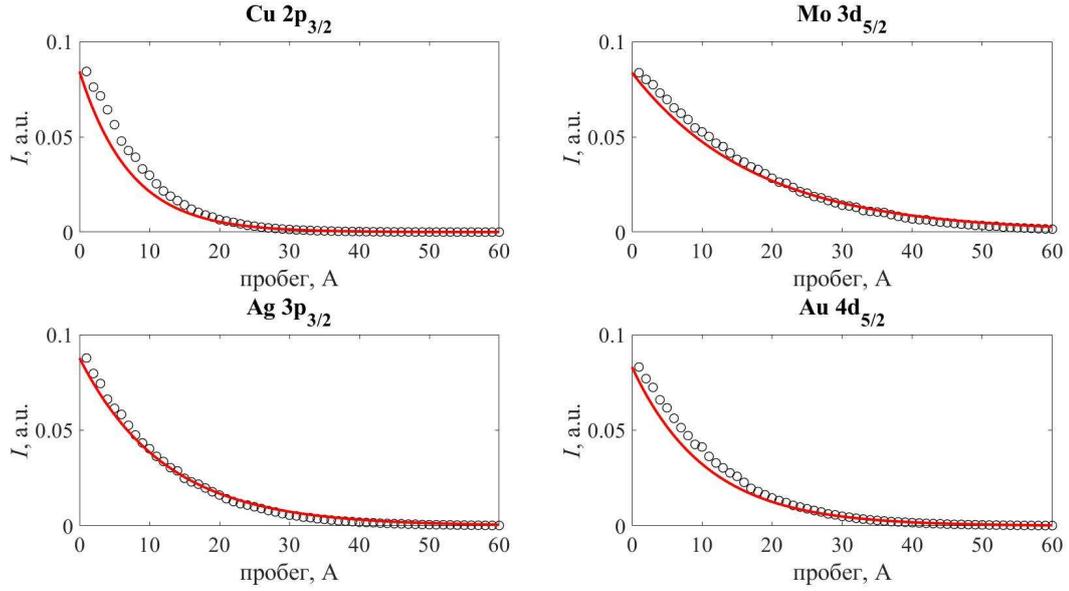


Рисунок 5.5 – Распределение фотоэлектронов по длине пробега. Линии – расчет на основе формулы (5.18); кружки – результаты моделирования [16,144]

Энергетический спектр фотоэлектронов определит свертка распределения фотоэлектронов по пробегам $Q\left(\frac{x}{l_{tr}}, \mu\right)$ с функцией Ландау $N\left(\frac{x}{l_{in}}, \Delta\right)$:

$$Q(\mu, \Delta) = \int_0^\infty Q\left(\frac{x}{l_{tr}}, \mu\right) N\left(\frac{x}{l_{in}}, \Delta\right) dx = \mu l_{in} \frac{\sigma_{x \rightarrow e}}{2} \sum_{k=0}^{\infty} x_{in}^k(\Delta) \left[\frac{1}{\left(1 + \frac{\zeta l_{in}}{4 l_{tr}}\right)^{k+1}} - \frac{\beta}{4} \frac{3\mu_1^2 - 1}{\left(1 + \frac{(1-x_2) l_{in}}{1-x_1} l_{tr}\right)^{k+1}} \right]. \quad (5.19)$$

В решении (5.19) особый интерес представляет слагаемое с $k = 0$, описывающее угловое распределение фотоэлектронов, вышедших в вакуум, не испытав неупругого рассеяния, и формирующих характеристические пики в спектрах РФЭС:

$$Q_0 = \mu l_{in} \frac{\sigma_{x \rightarrow e}}{2} \left[\frac{1}{\left(1 + \frac{\zeta l_{in}}{4 l_{tr}}\right)} - \frac{\beta}{4} \frac{(3\mu_1^2 - 1)}{\left(1 + \frac{1-x_2 l_{in}}{1-x_1} l_{tr}\right)} \right]. \quad (5.20)$$

Результаты расчета на основе формулы (5.20) с удовлетворительной точностью описывают результаты эксперимента [145] (рис. 5.6).

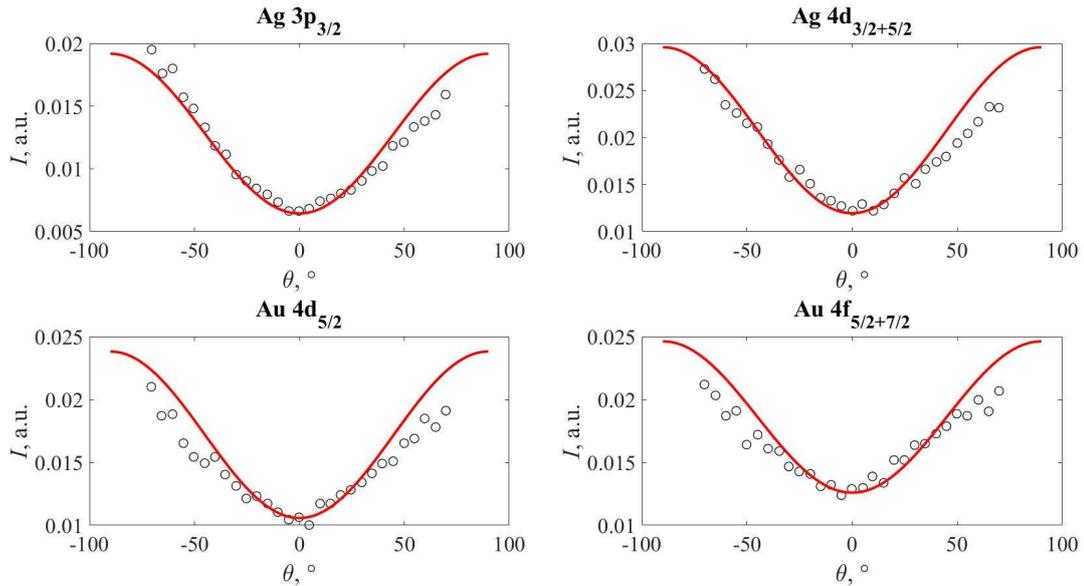


Рисунок 5.6 – Угловое распределение фотоэлектронов, вышедших в вакуум без неупругих потерь энергии. Линии – расчет на основе формулы (5.20); кружки – эксперимент [145]

Энергетический спектр фотоэлектронов (5.19) можно представить в виде разложения по парциальным коэффициентам:

$$Q(\mu, \Delta) = Q_0(\mu)\delta(\Delta) + \sum_{k=1}^{\infty} Q^k(\mu)x_{in}^k(\Delta), \quad (5.21)$$

где $Q^k(\mu)$ – парциальные коэффициенты; $\delta(\Delta)$ – дельта функция; $x_{in}^k(\Delta)$ – свертки дифференциального сечения неупругого рассеяния электронов.

Следуя решению (5.21), фотоэлектронный пик описывается дельта функцией. Однако в экспериментальных РФЭС спектрах, в отличие от симметричной Лоренцевской (естественной или атомарной) формы линии, РФЭС линия в проводниках асимметрична относительно энергии связи и, обычно, скошена к более высокой энергии связи, что является следствием многочастичного взаимодействия фотоэлектронов со свободными электронами на краю уровня Ферми, как показано Дониаком и Суничем. Форма линии Дониака-Сунича (D-S) определяется выражением:

$$I_{DS}(E) = \frac{(1-\alpha_{DS}) \cos\left\{\frac{\pi\alpha_{DS}}{2} + (1-\alpha_{DS}) \arctan\left[\frac{E_b^0 - E}{\frac{\Delta E_0}{2}}\right]\right\}}{\left[(E_b^0 - E)^2 + \left(\frac{\Delta E_0}{2}\right)^2\right]^{\frac{1-\alpha_{DS}}{2}}}, \quad (5.22)$$

где E_b^0 – энергия связи соответствующего уровня ядра подболочки; ΔE_0 – дисперсия естественной (Лоренцевской) линии; α_{D-S} – характеристический фактор асимметрии ($0 < \alpha_{D-S} < 0.5$).

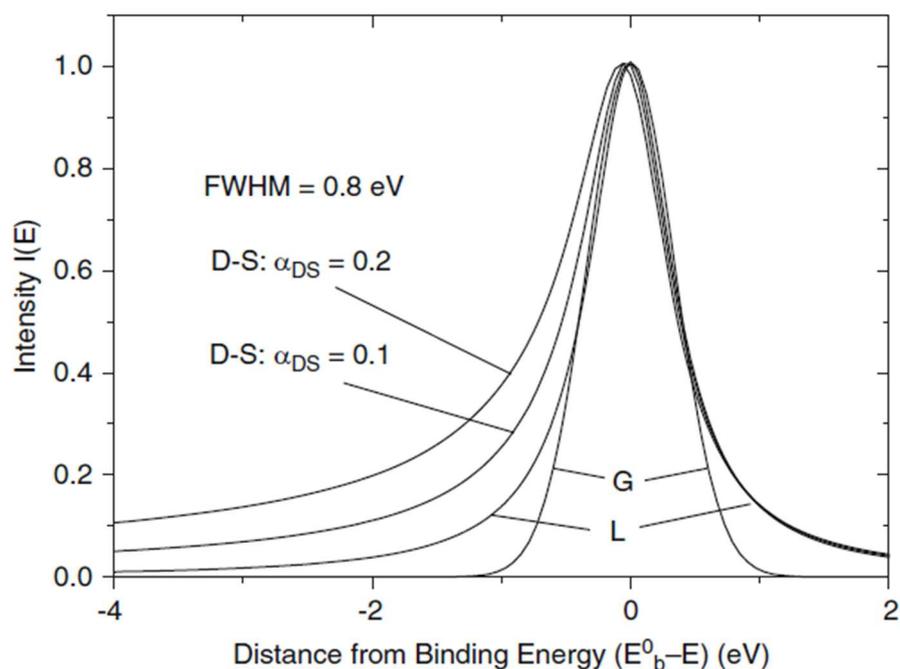


Рисунок 5.7 – Сравнение распределения Гаусса (G) с Лоренцевской зависимостью (L) и функцией Дониака-Сунича (D-S) при различных параметрах асимметрии α_{D-S} [14]

5.3 Исследование материалов на основе PES метода расшифровки сигналов РФЭС

5.3.1 Исследование вольфрама, подвергнутого плазменной обработке на установке ПЛМ

Вольфрам используется в качестве термозащитной облицовки первой стенки установок управляемого термоядерного синтеза (УТС). Плазменное

воздействие приводит к изменению физических и химических свойств материалов. При определенных условиях под воздействием плазмы на поверхности вольфрама образуются наноструктуры – вольфрамовый пух, т.е. происходят качественные изменения поверхности на макромасштабе. Плазменное воздействие может привести не только к макроизменениям, но также изменить и электронную структуру, т.е. привести к возникновению новой аллотропной разновидности материала, электро- и теплопроводность которой, а также законы потерь энергии заряженных частиц могут быть отличны от исходного. Вольфрам имеет две аллотропные формы – альфа фаза, обладающая кубической объемно-центрированной структурой, и бэта фаза с кубической кристаллической решеткой, возникающая при получении вольфрама методом электролиза.

5.3.1.1 Эксперимент на установке ПЛМ

Плазменная обработка в стационарной гелиевой плазме с параметрами пристеночной плазмы токамака вольфрамовых образцов, изготовленных из фольги марки ВА, выполнена на установке ПЛМ в «НИУ «МЭИ» [146]. При обработке образцов из вольфрама марки ВА ток плазменного разряда достигал значения 15 А, плотность плазмы до $3 \cdot 10^{18} \text{ м}^{-3}$, электронная температура до 4 эВ с фракцией горячих электронов до 30 эВ, время воздействия плазмы до 200 мин., плазменно-тепловая нагрузка на испытываемые образцы 0.5-1 МВт/м², температура поверхности образцов 950-1250 К, плотность потока ионов гелия $3 \cdot 10^{22} \text{ ион/м}^2\text{с}$. Во время обработки образца из вольфрама наблюдалось характерное уменьшение температуры образца при постоянном токе разряда в следствие увеличения поглотательной способности (степени черноты) поверхности в процессе роста наноструктурированного слоя типа «пух». Температура образцов измерялась с помощью термопары ТХА в защитной стальной оболочке и пирометра фирмы «Кельвин».

РФЭС эксперименты выполнены на установке Kratos Axis Ultra DLD с использованием K α линии Al с монохроматором в геометрии «magic angle». Образцы вольфрама предварительно прогревались в вакууме при температуре 600°C и очищались потоком ионов Ar. На обзорном спектре вольфрамового пуха наблюдаются: W – 75%, O – 14%, C – 8.5%, N – 2.5%. Представленные данные определены с помощью соотношения площадей под пиками фотоэлектронов или так называемого PSA анализа. Стоит отметить, что информационная глубина PSA анализа составляет величину $l_{inf} = 3l_{in}\cos(\theta)$, где θ – угол между направлением детектирования фотоэлектронов и нормалью к поверхности; l_{in} – средняя длина свободного пробега фотоэлектронов в данном материале на энергии, определяемой по формуле Эйнштейна для фотоэффекта. Данная формула следует из того, что пики фотоэмиссии формируют электроны, которые вышли в вакуум, не испытав неупругих потерь энергии. Вероятность данного процесса определяет закон Бугера – $\exp(-s/l_{in}\cos(\theta))$, где s – пробег фотоэлектронов в мишени. Если $s = l_{inf}$, то из формулы Бугера следует, что из глубины мишени, равной информационной глубине, в анализатор попадает 5% от исходного потока фотоэлектронов, что считается предельным значением регистрируемого сигнала. Для 4p линии вольфрама при использовании Al катода при $\theta = 0$ получим $l_{inf} = 4.5$ нм, для 4f линии вольфрама $l_{inf} = 5.7$ нм.

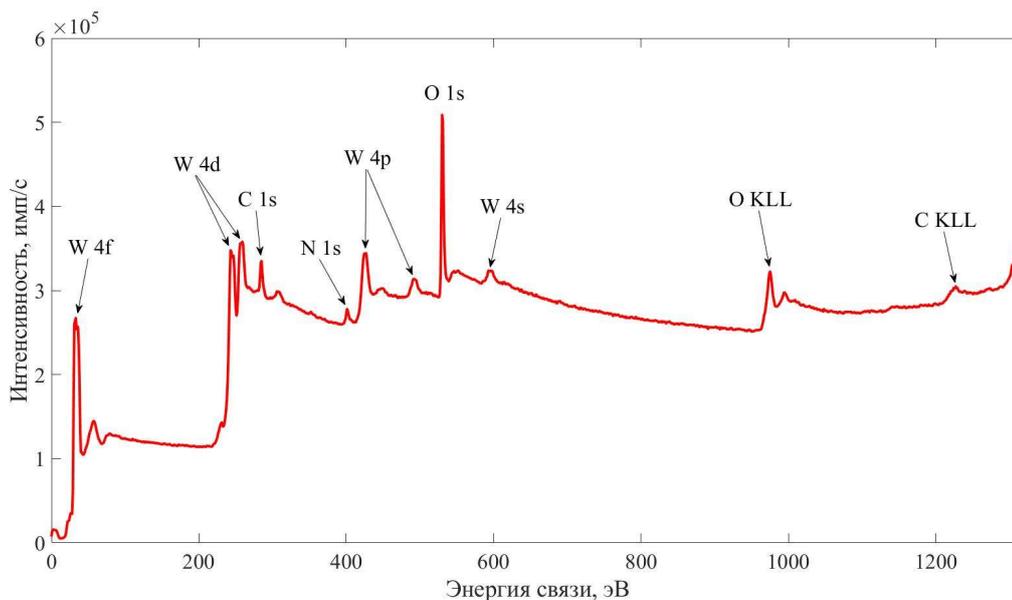


Рисунок 5.8 – Обзорный РФЭС спектр вольфрамового «пуха»

5.3.1.2 PES анализ экспериментальных данных

Аллотропная структура материала определяется видом дифференциального сечения неупругого рассеяния электронов $x_{in}(\Delta)$ в данном материале. Литературных данных по $x_{in}(\Delta)$ для вольфрама не существует. Задача определения дифференциального сечения неупругого рассеяния $x_{in}(\Delta)$ или мнимой части диэлектрической проницаемости среды из РФЭС спектров относится к классу некорректных задач математической физики и наиболее адекватным методом ее решения является процедура подбора [147] расчетного и экспериментального спектров. Итогом процедуры подбора является минимизация функционала:

$$F = \int_0^{\Delta^{\max}} |R_{exp}(\Delta, \mu_0, \mu, \varphi) - R_{cal}(\Delta, \mu_0, \mu, \varphi)| d\Delta, \quad (5.23)$$

где $R_{exp}(\Delta, \mu_0, \mu, \varphi)$ – экспериментальный спектр; $R_{cal}(\Delta, \mu_0, \mu, \varphi)$ – расчетный спектр.

Расчетный спектр вычисляется на основе формулы (5.19). Дифференциальное сечение неупругого рассеяния электронов рассчитывается в рамках подхода (5.8 – 5.11).

Воздействие плазмы на вольфрам привело к тому, что его поверхность покрылась слоем нановолокон – вольфрамовым «пухом». Таким образом, возникает вопрос об электронной структуре новообразования. Для того чтобы установить, образуется ли новая аллотропная форма вольфрама при его взаимодействии с плазмой (при образовании вольфрамового «пуха») необходимо восстановить дифференциальное сечение неупругого рассеяния электронов в вольфраме и вольфрамовом «пухе». При восстановлении дифференциального сечения неупругого рассеяния электронов в полуметаллах и металлах, например, в вольфраме, необходимо учитывать различия в законах потерь энергии электронов в приповерхностном слое и в массиве материала, удаленном от поверхности [148]. В таком случае поверхность материала рассматривается как слоисто-неоднородный объект с различными законами потерь энергии в приповерхностных слоях – surface $x_{inS}(\Delta)$ и в удаленном от поверхности однородном массиве материала – bulk $x_{inB}(\Delta)$. На рис. 5.9 представлен вид дифференциальных сечений $x_{inB}(\Delta)$ и $x_{inS}(\Delta)$ для вольфрама.

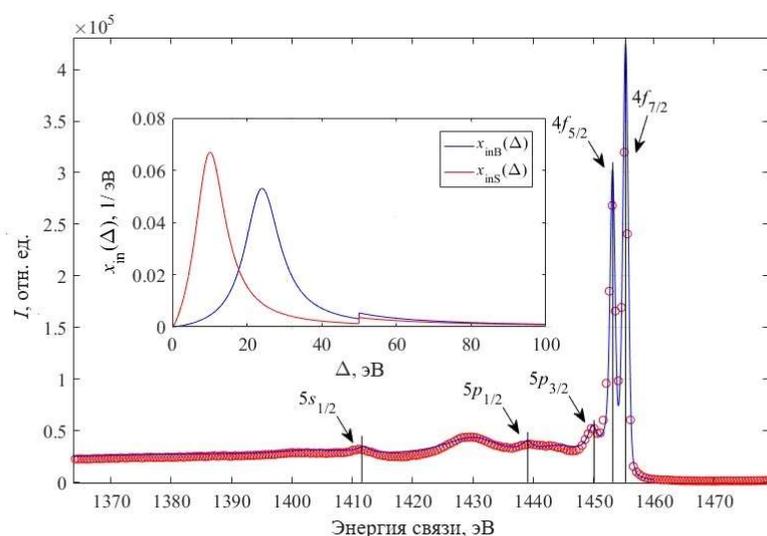


Рисунок 5.9 – РФЭС спектр 4f линии вольфрама. Кружки – эксперимент; линия – расчет на основе формулы (5.19) с учетом потерь энергии электронов в приповерхностном слое

Сечения поликристаллического вольфрама, представленные на рис. 5.9, получены и апробированы в работе [148]. На основе данных сечений и с помощью представленной в данной работе PES методики описаны измеренные экспериментальные РФЭС спектры как для вольфрамовой фольги, не обработанной плазмой, так и вольфрамового «пуха». Стоит отметить, что информационная глубина анализа вольфрама при использовании 4f пика на основе PES подхода составляет 11 нм. Результаты анализа экспериментальных спектров представлены на рис. 5.10.

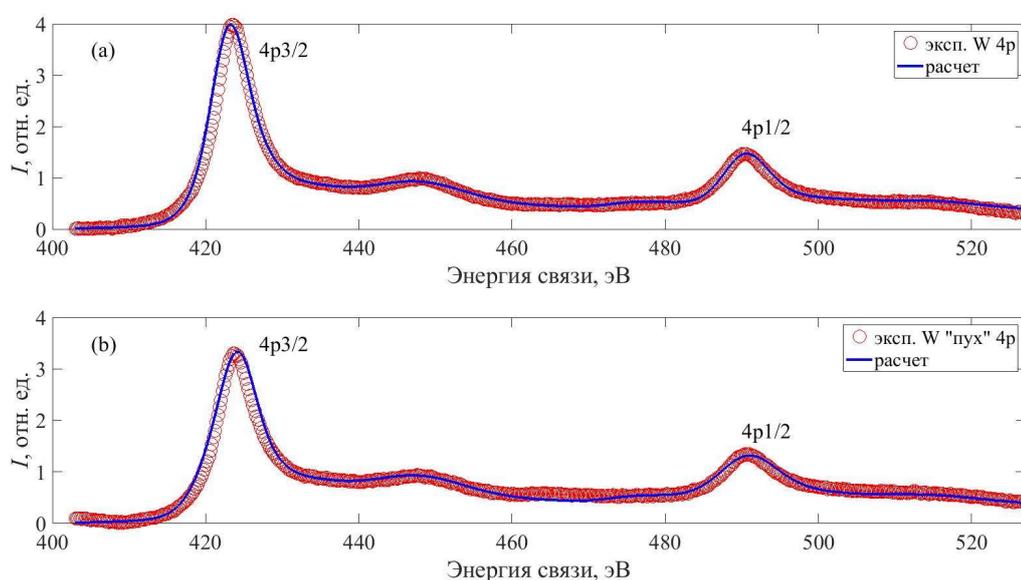


Рисунок 5.10 – РФЭС спектры 4p линии вольфрама (а) и вольфрамового «пуха» (б), снятые с высоким разрешением. Кружки – эксперимент; линии – расчет на основе формулы (5.19)

Рис. 5.10 демонстрирует, что используемые дифференциальные сечения неупругого рассеяния электронов с хорошей точностью описывают как РФЭС спектры необработанного вольфрама, так и обработанного плазмой вольфрама, т.е. вольфрамового «пуха», что позволяет уверенно утверждать об отсутствии новой аллотропной формы вольфрама в «пухе». И в исходной вольфрамовой фольге и в пухе вольфрам находился в альфа – фазе. Стоит отметить, что при

расчете РФЭС спектров 4f линии вольфрама был учтен вклад в пики, связанный с потерями энергии на так называемый intrinsic excitation (рис. 5.10 (a)). При расчете РФЭС спектров 4f линии вольфрамового «пуха» было учтено наличие карбида вольфрама (рис. 5.10 (b)), что демонстрирует рис. 5.11. Карбид вольфрама образуется при плазменной обработке поверхности вольфрама в среде углерода. Его наличие говорит о присутствии углерода в вольфрамовой фольге.

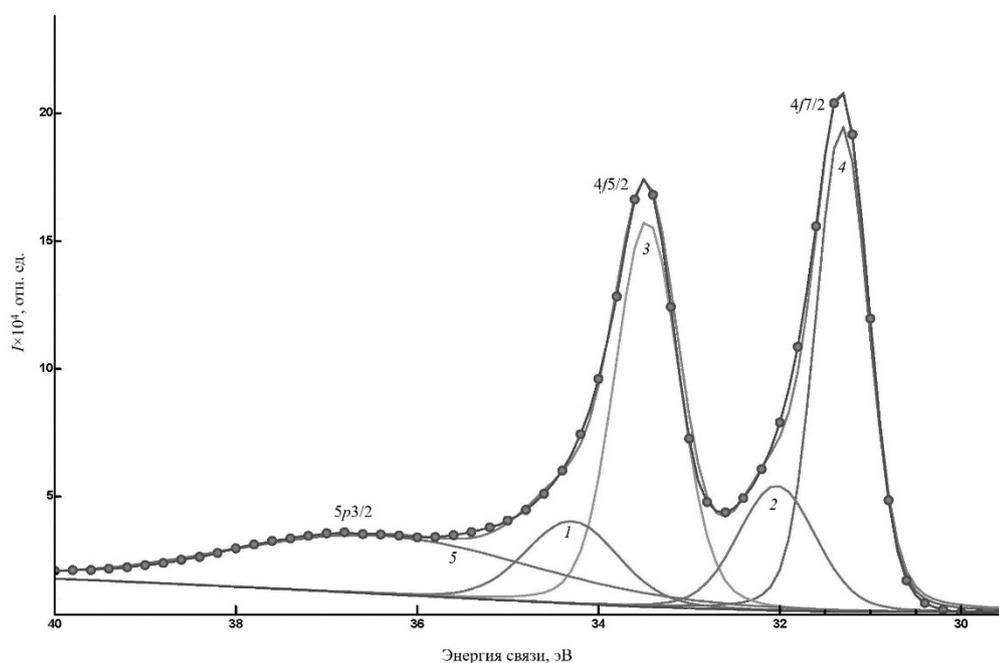


Рисунок 5.11 – РФЭС спектр 4f линии вольфрамового «пуха», снятый с высоким разрешением. (1), (2) – WC; (3), (4) – 4f5/2 и 4f7/2 соответственно; (5) – 5p3/2

На рис. 5.11 представлен PSA анализ области 4f линии вольфрамового «пуха», снятой с высоким разрешением в режиме $E_{\text{pass}} = 40$ эВ. Рис. 5.11 демонстрирует, что 4f пики состоят из пиков чистого вольфрама и карбида вольфрама – WC, занимающего 10% поверхности.

Таким образом, воздействие плазмы на вольфрам приводит к тому, что его поверхность покрывается слоем нановолокон – вольфрамовым “пухом”. В настоящей работе проведен РФЭС анализ исходного вольфрамового образца и образца, покрытого вольфрамовым “пухом”. Показано, что измеренные РФЭС спектры как для исходного образца вольфрама, так и для обработанного плазмой с одинаковой точностью описываются одними и теми же сечениями – дифференциальным сечением неупругого рассеяния электронов в однородном массиве, удаленном от поверхности – $x_{inB}(\Delta)$, и в приповерхностной области – $x_{inS}(\Delta)$, что однозначно утверждает о неизменности аллотропного вида вольфрама в результате плазменной обработки. Другими словами, электронная структура вольфрамового пуха идентична электронной структуре вольфрама. Однако, отмечено, что поверхность “пуха”, в отличие от поверхности вольфрама, частично покрыта карбидом вольфрама.

5.3.2 Исследование пиролитического графита и графена

Ван-дер-Ваальсовские структуры [149,150] обладают уникальными физико-химическими свойствами и перспективами технологических применений. Такие структуры являются основой для создания многослойных квазидвухмерных и трехмерных материалов. Электронная структура пиролитического графита, который можно рассматривать как модельную систему этого класса материалов, является предметом детальных экспериментальных [151–154] и теоретических исследований [155,156]. Идеальная структура графита представляет собой систему равноотстоящих гексагональных плоских поверхностей, расположенных параллельно друг другу. Электронные характеристики таких структур зависят от их размеров. Электронная характеристика структур, состоящих из семи и более слоев графена, не изменяется. Указанная закономерность продемонстрирована в работе [157], в которой представлены измеренные EELS (Electron Energy Loss Spectrometry) спектры графена с различным числом слоев (рис. 5.12).

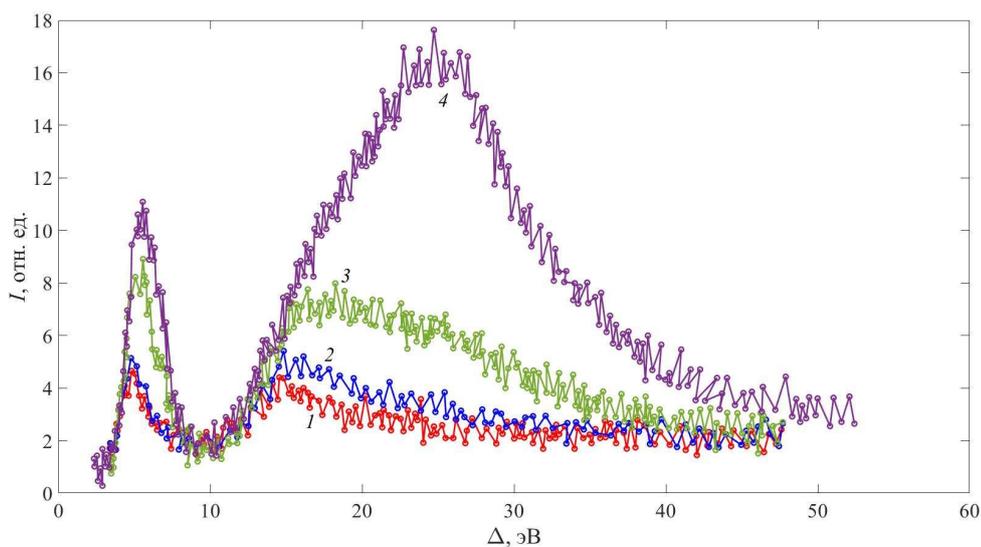


Рисунок 5.12 – Энергетические спектры характеристических потерь энергии электронов (EELS), измеренные при прохождении электронов с энергией 100 кэВ через однослойный графен (1), двухслойный графен (2), пятислойный графен (3), десятислойный графен (4)

Более полная информация об электронных характеристиках гексагональных слоев, составляющих структуру графита, может быть получена путем измерения спектров потерь энергии электронов при различных углах падения электронного пучка относительно гексагональной плоскости графита. В работах [156,158] выполнены измерения спектров характеристических потерь энергии электронов в графите с высоким разрешением (High Resolution Electron Energy Loss Spectrometry – HREELS). Отмечено смещение пика π -плазмонного возбуждения в область меньших потерь энергии с уменьшением угла θ между переданным от электрона импульсом и c -осью графита. При угле $\theta = 0$ пик π -плазмонного возбуждения практически исчезает. В экспериментах с графеном разной слойности (рис. 5.12) наблюдается смещение пиков π и $\pi+\sigma$ -плазмонных возбуждений в область больших потерь энергии с ростом числа слоев графена. Пик, соответствующий потерям энергии электронов на возбуждение $\pi+\sigma$ -плазмонных колебаний, измеренный в работе [156], с увеличением угла θ также смещается в область больших потерь энергии.

Отмеченные выше исследования спектра электронных возбуждений в графите реализованы с помощью измерения EELS спектров при большой передаче импульса от электронов с энергией зондирования порядка 100 кэВ в работе [157], и энергий, не превышающих 100 эВ, в работах [156,158]. В настоящей работе исследуются энергетические спектры рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии (РФЭС) высоко ориентированного пиролитического графита (ВОПГ), измеренные с угловым разрешением, при энергии фотоэлектронов порядка 1200 эВ. Область энергетического спектра вблизи 1s пика углерода измерена с высоким разрешением. Исследуется динамика изменения дифференциальных сечений неупругого рассеяния фотоэлектронов, наблюдаемая при увеличении угла детектирования, отсчитываемого от *c*-оси графита.

5.3.2.1. Эксперимент

Экспериментальные спектры рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии ВОПГ измерены на установке Kratos Axis Ultra DLD с использованием $K\alpha$ линии Al с монохроматором в геометрии «magic angle». Проведение экспериментов с угловым разрешением позволяет изменять число слоев графена, формирующих РФЭС сигнал. Угол детектирования фотоэлектронов составлял 0° , 60° , 80° и 85° градусов к нормали по отношению к графеновому слою (к *c*-оси). Очистка поверхностного слоя выполнена с помощью скотча в технике Новоселова [157]. Обзорные спектры сняты с разрешением $E_{\text{pas}} = 160$ эВ, область потерь энергии вблизи 1s пика – $E_{\text{pas}} = 40$ эВ.

Удовлетворительную чистоту поверхности образца подтверждает факт отсутствия регистрируемых пиков примесей на обзорном РФЭС спектре (рис. 5.13).

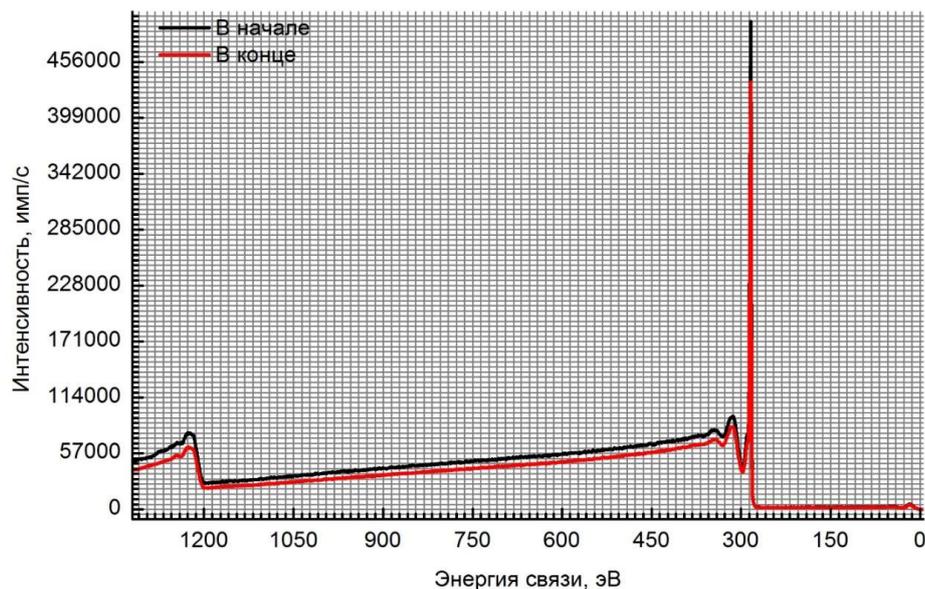


Рисунок 5.13 – Обзорный РФЭС спектр ВОПГ

Следует отметить, что качественное изменение спектров потерь энергии электронов, наблюдаемое при изменении угла детектирования, согласуется с изменениями, наблюдаемыми в HREELS экспериментах [156,158].

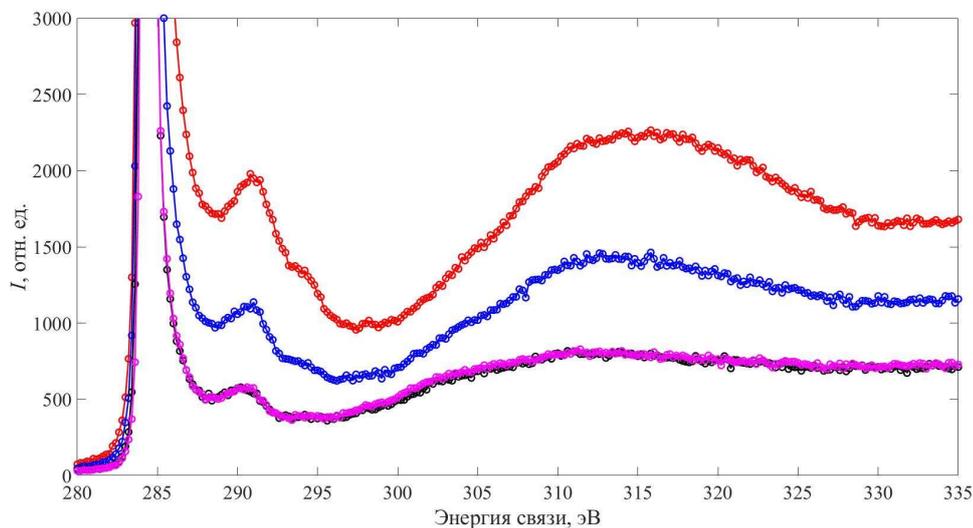


Рисунок 5.14 – Экспериментальный РФЭС спектр области 1s пика ВОПГ и прилегающей области потерь энергии фотоэлектронов. Угол детектирования фотоэлектронов: 0° (красная линия), 60° (синяя линия), 80° (черная линия) и 85° (фиолетовая линия)

На рис. 5.14 приведено сравнение РФЭС спектров ВОПГ, измеренных при энергии электронного пучка 1200 эВ для различных углов детектирования фотоэлектронов. В зависимости от угла детектирования в данных экспериментах изменяется число графеновых слоев, формирующих РФЭС сигнал. При детектировании фотоэлектронов под углом 0° вклад нижележащего второго слоя графена к сигналу, получаемому от первого верхнего слоя, составляет $I = I_2 \exp(-d/l_{in})$ (где $d = 0.34$ нм – расстояние между графеновыми слоями, $l_{in} = 3.1$ нм – средний пробег электронов между неупругими соударениями). При детектировании фотоэлектронов под углом 80° вклад второго слоя становится равным $I = I_2 \exp(-5.8d/l_{in})$, т.е. в 330 раз меньше, чем в случае детектирования фотоэлектронов под углом 0° . РФЭС сигналы для 80° и 85° оказались практически идентичны, что указывает на то, что данные спектры сформированы лишь верхним графеновым слоем. Это позволяет сравнить набор спектров, представленных на рис. 5.14, с спектрами, представленными на рис. 5.12, и отметить похожую динамику, происходящую при увеличении числа слоев графена, в которых происходят потери энергии электронов. Подчеркнем, что в данном случае возможно провести только качественное сравнение, поскольку EELS эксперимент на рис. 5.12 выполнен при энергии 100 кэВ, HREELS эксперименты в работах [156,158] выполнены на энергии 50 эВ, РФЭС эксперименты, представленные в данной работе, измерены при энергии фотоэлектронов 1200 эВ. Величины характеристических энергий плазменных возбуждений в графите не зависят от энергии зондирующих электронов, однако, энергия зондирующих электронов определяет силы осцилляторов различных плазменных возбуждений и, соответственно, вклады каждого из возбуждений в суммарное дифференциальное сечение неупругих потерь энергии электронов.

5.3.2.2. PES анализ экспериментальных данных

На основе теоретических представлений (5.8 – 5.11) и (5.19), т.е. в рамках PES анализа, из экспериментальных данных, представленных на рис. 5.12 и 5.14,

восстановлены дифференциальные сечения неупругого рассеяния электронов в исследуемых материалах (рис. 5.15 и 5.16).

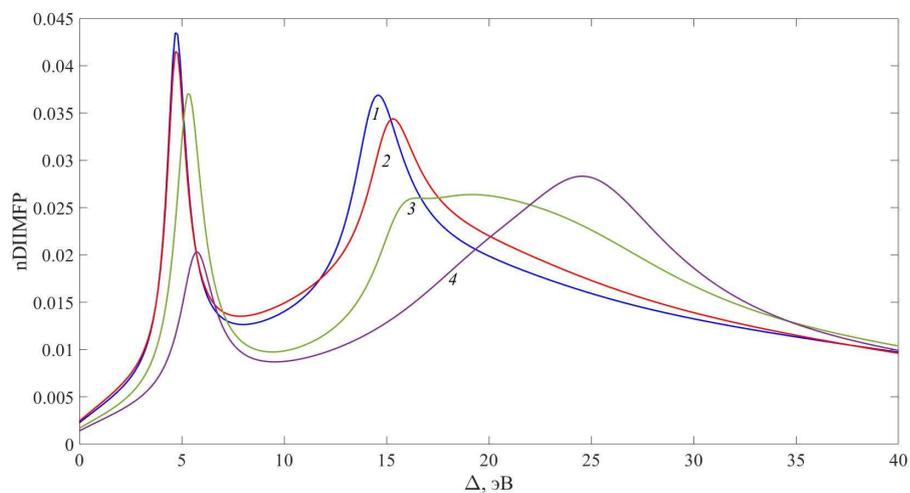


Рисунок 5.15 – Дифференциальные сечения неупругого рассеяния электронов, восстановленные из экспериментальных данных [157] (рис. 5.12) для однослойного (1), двухслойного (2), пятислойного (3) и десятислойного (4) графена

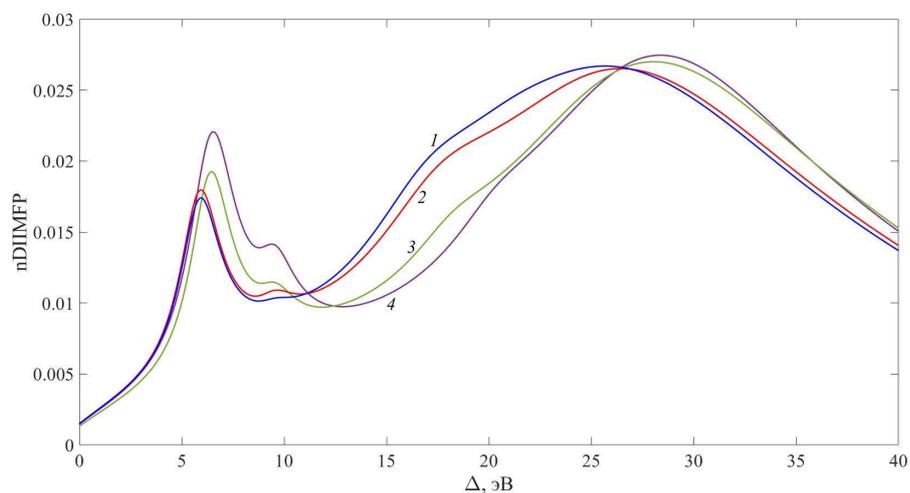


Рисунок 5.16 – Дифференциальные сечения неупругого рассеяния электронов в ВОПГ как функция угла детектирования 85° (1), 80° (2), 60° (3), 0° (4), отсчитываемого от нормали к графеновым плоскостям, восстановленные из экспериментальных данных (рис. 5.14)

Представленные на рис. 5.15 и рис. 5.16 сечения $x_{in}(\Delta)$ имеют как аналогичные особенности, так и резкие количественные различия. На рис. 5.15 с ростом числа графеновых слоев наблюдается смещение максимумов пиков π и $\pi+\sigma$ -плазмонных возбуждений в сторону больших потерь энергии. На рис. 5.16 отсутствует заметная динамика в области пика $\pi+\sigma$ -плазмонного возбуждения, наблюдаемая на рис. 5.15.

5.3.2.3. Выводы по пункту 5.3.2

РФЭС анализ высоко ориентированного пиролитического графита с угловым разрешением выполнен с целью установить зависимость спектра потерь энергии фотоэлектронов от числа графеновых слоев, формирующих экспериментальный РФЭС сигнал. Средняя длина свободного пробега электронов в углероде для энергии, соответствующей 1s пику углерода ($E = 284.4$ эВ), составляет 3.1 нм. При детектировании фотоэлектронов под углами 80° и 85° вероятность того, что в пиролитическом графите фотоэлектроны пройдут межслойное расстояние без неупругих потерь энергии, составляет около 30%, поэтому при данных углах детектирования основной вклад в результирующий РФЭС сигнал вносит верхний слой графена.

РФЭС спектры, соответствующие 1s пику углерода с примыкающей к пику областью потерь энергии, представлены на рис. 5.14. Из рис. 5.14 видно, что РФЭС спектры для углов детектирования фотоэлектронов 80° и 85° практически идентичны, т.е. при увеличении угла детектирования на 5° изменений в законах потерь энергии электронов не происходит, что в свою очередь подтверждает утверждение о ничтожно малом вкладе фотоэлектронов, родившихся в нижних слоях ВОПГ, в суммарный РФЭС сигнал и преобладающем вкладе верхнего слоя графена. РФЭС спектрам, представленным на рис. 5.14, соответствуют восстановленные дифференциальные сечения неупругого рассеяния электронов, представленные на рис. 5.16. Отметим, что как в спектрах на рис. 5.14, так и в дифференциальных сечениях на рис. 5.16 хорошо видна особенность в потерях

энергии фотоэлектронов на энергии 10 эВ. Эта особенность на 10 эВ наблюдалась и ранее в работах [159–161].

Основные экспериментальные результаты работы представлены на рис. 5.16. Нормированные дифференциальные сечения неупругого рассеяния электронов на рис. 5.16 описывают вероятность потерь энергии фотоэлектрона в результате элементарного акта неупругого рассеяния. Графики на рис. 5.16 демонстрируют, что с ростом угла детектирования фотоэлектронов вероятность потерь энергии электронов на возбуждение плазменных колебаний в области π -плазмонного пика заметно падает и смещается в область меньших энергий. Графики на рис. 5.15 демонстрируют, что при уменьшении числа слоев графена, сквозь которые проходят электроны, пик π -плазмонного возбуждения смещается в область меньших потерь энергии, однако, при этом, в отличие от ситуации, представленной на рис. 5.16, растут относительные потери электронов на возбуждение π -плазмонных возбуждений.

Дифференциальные сечения, представленные на рис. 5.16, демонстрируют, что с увеличением угла детектирования фотоэлектронов происходит смещение пика $\pi+\sigma$ -плазмонных колебаний в область меньших потерь энергии на 3-4 эВ и пика π -плазмонных колебаний на 0.5-1 эВ. Радикального изменения законов потерь энергии как на рис. 5.15, справедливого для слоев графена, не наблюдается. На рис. 5.15 наблюдается переход от максимума в потерях на $\pi+\sigma$ -плазмонные возбуждения в области 17 эВ для однослойного графена к потерям, максимум которых приходится на энергию 28 эВ в десятислойном графене; в пятислойном графене видна промежуточная ситуация с максимумами при 17 и 28 эВ. Указанное поведение говорит об усилении механизмов плазмонных возбуждений, перпендикулярных плоскости, по сравнению с возбуждениями плазменных колебаний вдоль плоскости, которые связаны с sp^2 гибридизацией.

Законы потерь энергии электронов $x_{in}(\Delta)$, представленные на рис. 5.16 (за исключением отмеченных выше особенностей), похожи на законы потерь энергии электронов в многослойном графене (рис. 5.15). Этот факт является

следствием природы плазменных колебаний. Плазменные колебания – это коллективный процесс, происходящий во всем массиве мишени. Наблюдая РФЭС спектр, созданный на 70% только верхним слоем графита (рис. 5.16; графики для 80° и 85°), видно, что фотоэлектроны теряют энергию на возбуждение плазмонных колебаний во всем массиве мишени. Наличие плазмонных возбуждений свидетельствует о наличии свободных электронов и металлических свойствах графита.

Таким образом РФЭС анализ и PES анализ расшифровки его результатов позволяют однозначно утверждать, 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.

5.3.3 Исследование графита, используемого в качестве первой стенки токамака EAST

Углерод – материал, обладающий рядом замечательных свойств, среди которых низкий атомный номер и высокая температура плавления, которые позволяют рассматривать его в качестве материала «первой стенки» термоядерных реакторов. Недостатком углерода является возможность химического распыления его поверхности с образованием метана, метила и радикалов – C_nH_n [162], которые, диссоциируя в плазме, способны, оседая на поверхностях токамака, образовывать углеводородные пленки, что приводит к так называемой «третиевой проблеме» [163].

В токамаке Experimental Advanced Superconducting Tokamak (EAST) графитовые покрытия использовались в различных областях токамака [164], но, начиная с 2021 года, от его использования полностью отказались. В настоящее время графит марки МПГ-8 используется в токамаке Т-15МД, углеродные покрытия из Carbon Fiber Composition (CFC) используются в стеллараторе Wendelstein 7-Х. Используется графит и в других термоядерных установках.



Рисунок 5.17 – Образец графита марки АТJ, обработавший в качестве первой стенки токамака EAST

В настоящей диссертационной работе проведено исследование мелкозернистого графита марки АТJ, используемого в течение семи лет в качестве материала первой стенки в области high field side (HFS) токамака EAST.

5.3.3.1 Оптическая и электронная микроскопия. РФЭС Peak Shape Analysis

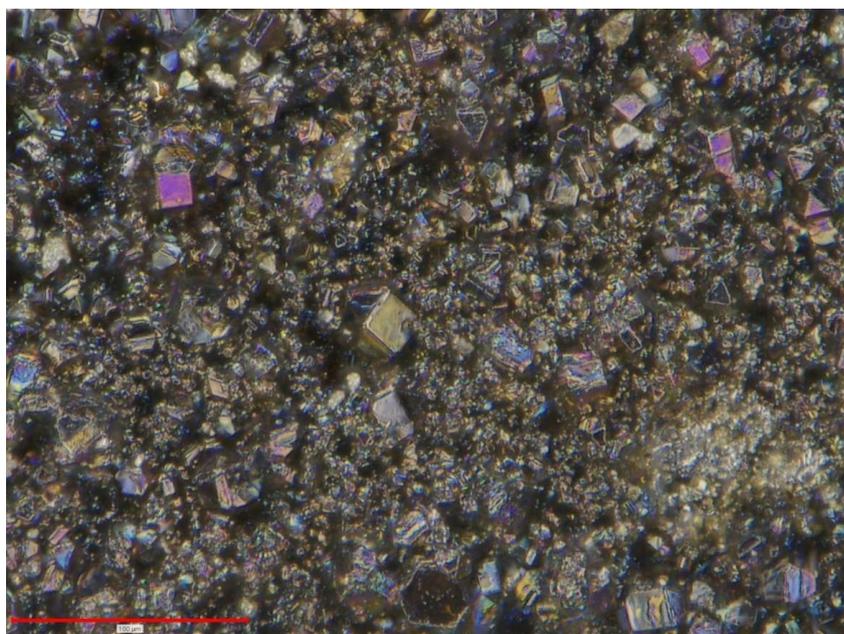


Рисунок 5.18 – Фотография поверхности графитового образца, обращенной к плазме токамака EAST, сделанная в оптический микроскоп

Стоит отметить, что при нарезании образцов малого размера для анализа материала (рис. 5.18) отмечалась очень высокая твердость и механическая прочность покрытия. Полотно ручной пилы по металлу мгновенно выходило из строя и требовалась замена. На фотографии, сделанной в оптический микроскоп (рис. 5.18), наблюдается «россыпь» кристаллов различного размера, максимальный размер которых составляет около 25 мкм.

Исследование графитового образца с помощью рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии выполнено на установке Kratos Axis Ultra DLD с использованием $K\alpha$ линии Al с монохроматором в геометрии «magic angle». Выполнено РФЭС исследование поверхности образца, обращенной к плазме (области № 1, 2 и 3 на рис. 5.17), анализ на глубине 3 мм от поверхности образца со стороны области поверхности № 2 и обратной стороны образца, не обращенной к плазме. При проведении РФЭС измерений зарядка образца наблюдалась только при анализе областей поверхностного слоя. Слой, расположенный на глубине 3 мм от поверхности, а также обратная сторона графитового образца при РФЭС анализе не заряжался.

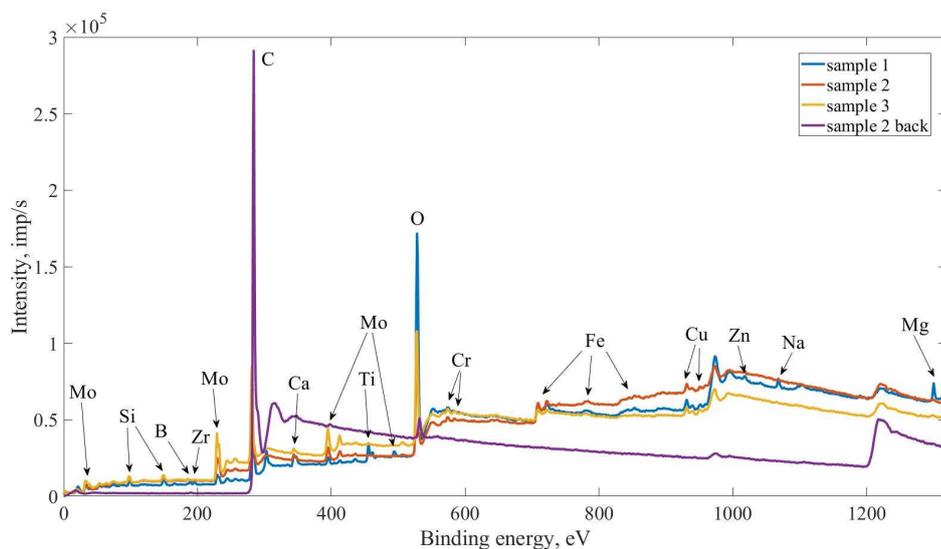


Рисунок 5.19 – Обзорные РФЭС спектры. Область №: 1 (голубая линия), 2 (оранжевая линия), 3 (желтая линия). Область графита на глубине 3 мм от поверхности – фиолетовая линия

На рис. 5.19 представлены обзорные РФЭС спектры, измеренные в областях № 1, 2 и 3 поверхности и на глубине 3 мм. Поверхностный слой обращенного к плазме графита обладал ярко выраженными диэлектрическими свойствами: происходила интенсивная зарядка образца при рентгеновском зондировании поверхности на длине волны K_{alf} алюминия вследствие эмиссии фотоэлектронов. На поверхности графита наблюдается большое количество элементов конструкционных материалов токамака, причем наиболее интенсивно покрыта перепыленными компонентами область поверхности образца № 1, находящаяся наиболее близко к области, разрушенной разрядом. Наличие элементов, являющихся составляющими конструкционных материалов токамака, обращенных к плазме, связано с зарядкой графитового образца и, как следствие, возникновением электрических дуг, следы которых наблюдаются на разрушенной области № 1 на рис. 5.17. Традиционный Peak Shape Analysis показал наличие в поверхностных, обращенных к плазме областях образца, следующих элементов: С – 38 %, О – 16 %, Мо – 19%, Si – 13%, Fe – 4%, Cr – 3%, Са – 3%, Cu – 2%, В – 2% (область № 2), что находится в соответствии с выполненным также рентгеноспектральным анализом. Стоит отметить, что рентгеноспектральный анализ дает информацию о компонентном составе мишени в слое, толщиной, примерно равной транспортному пробегу l_{tr} зондирующих электронов. Для начальной энергии электронов 10 кэВ $l_{tr} = 2$ мкм. Отметим, что информационная глубина традиционного РФЭС анализа или PSA анализа, определяемая длиной свободного неупругого пробега электронов, на 3 порядка меньше и составляет несколько нм. РФЭС спектр области образца, находящейся на расстоянии 3 мм от поверхности, представляет РФЭС спектр, характерный для графита.

Вследствие интенсивной зарядки образца при РФЭС анализе и результатов оптической микроскопии было выдвинуто предположение, что поверхность графита покрыта алмазоподобными структурами. Наличие на поверхности графита, обращенной к плазме, алмазоподобных структур подтверждает

увеличенная ширина пика фотоэлектронов, вышедших в вакуум без неупругих потерь энергии с 1s уровня углерода (рис. 5.20). Эта особенность отмечалась в работе [165]. К уширению 1s пика приводит и наличие в поверхностных слоях углеводородов [166].

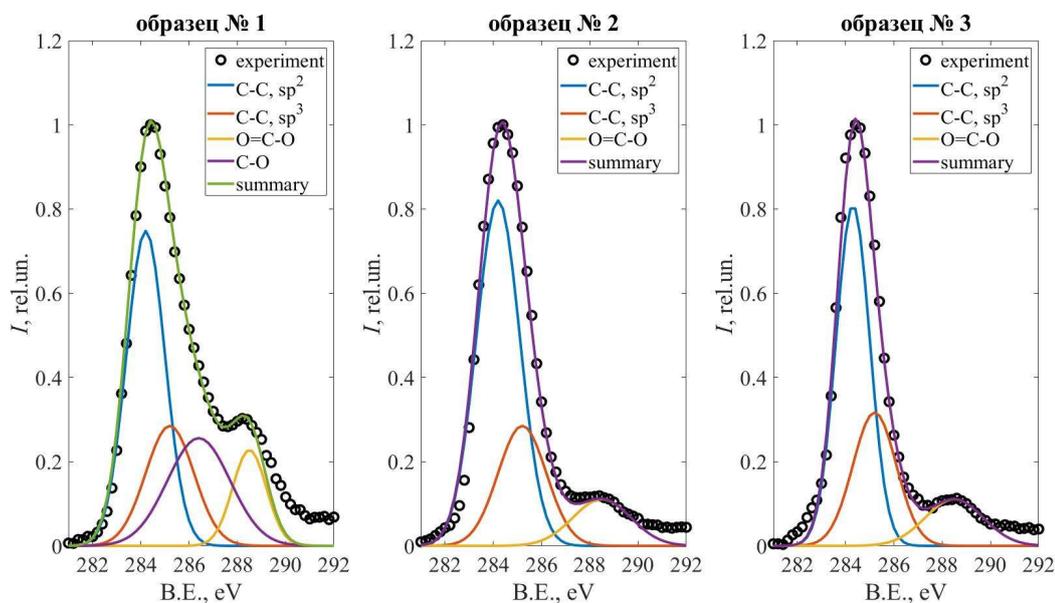


Рисунок 5.20 – 1s пик углерода, снятый с высоким разрешением для областей обращенной к плазме поверхности № 1, № 2 и № 3

Выполненный PSA анализ (рис. 5.20) подтверждает наличие sp^2 и sp^3 связи углерода на поверхности графита. sp^2 связь соответствует состоянию углерода в графите. Уширение фотоэлектронных пиков происходит вследствие роста sp^3 составляющей вследствие, сперва, образования углеводородов на поверхности графита, а, затем, образования алмазоподобных покрытий, в которых углерод также находится в sp^3 гибридизации. PSA анализ показал, что, несмотря на более активное окислирование области № 1 образца, отношение площадей под пиками sp^2 и sp^3 гибридизаций для всех трех областей примерно одинаково и соответствует двукратному превышению графитовой sp^2 гибридизации над алмазной sp^3 гибридизацией. Данный результат указывает на одинаковое количество алмазоподобного покрытия на всей поверхности образца графита.

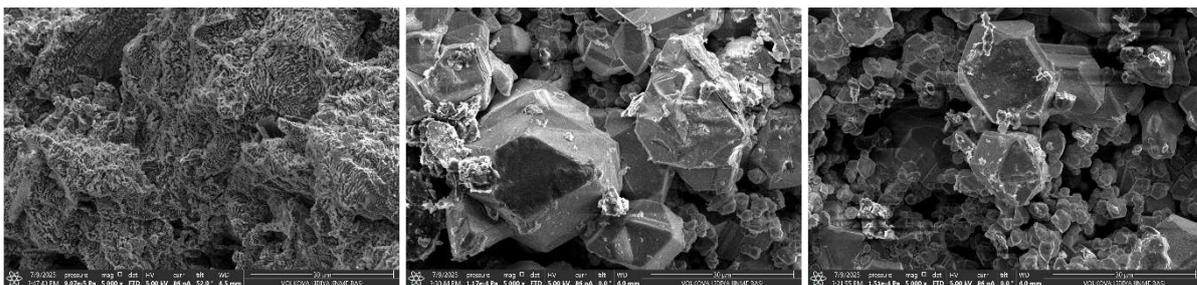


Рисунок 5.21 – Результаты электронной микроскопии образца в областях № 1, № 2 и № 3 (слева направо соответственно)

Размеры углеводородных кристаллов в областях № 2 и 3, в которых углерод находится в sp^3 гибридизации (рис. 5.21), соответствуют размеру зерен исходного мелкозернистого прочного графита АТJ.

5.3.3.2 РФЭС Photo Electron Spectra analysis

Однозначно ответить на вопрос, что из себя представляют наблюдаемые кристаллы, и в какой аллотропной форме находится углерод на поверхности графита можно, осуществив анализ области потерь энергии фотоэлектронов или PES анализ. Законы потерь энергии электронов в различных аллотропных формах углерода различны и имеют свои уникальные особенности [167] (рис. 5.22).

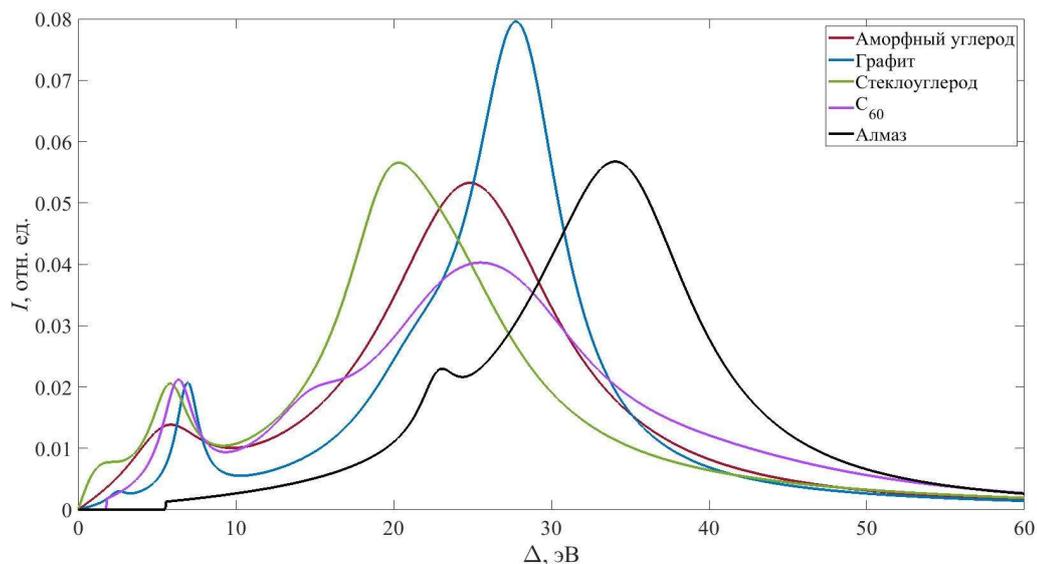


Рисунок 5.22 – Нормированное дифференциальное сечение неупругого рассеяния электронов для различных аллотропных форм углерода

Графит имеет ярко выраженную двухпиковую структуру сечения, состоящую из π -плазмонного пика, имеющего максимум на энергии 7 эВ, и $\pi + \sigma$ -плазмонного пика на энергии 28 эВ. Алмаз, являясь диэлектриком, имеет нулевую область в сечении от 0 до 5.5 эВ и максимум сечения на энергии 35 эВ.

Ранее в работах [168,169] с помощью методов электронной спектроскопии было исследовано содержание изотопов водорода в углеводородных пленках, формирующихся в результате воздействия термоядерной плазмы на графитовые материалы. Было восстановлено дифференциальное сечение неупругого рассеяния электронов в пленках $\text{C}_x\text{H}_{1.3}$ (рис. 5.23).

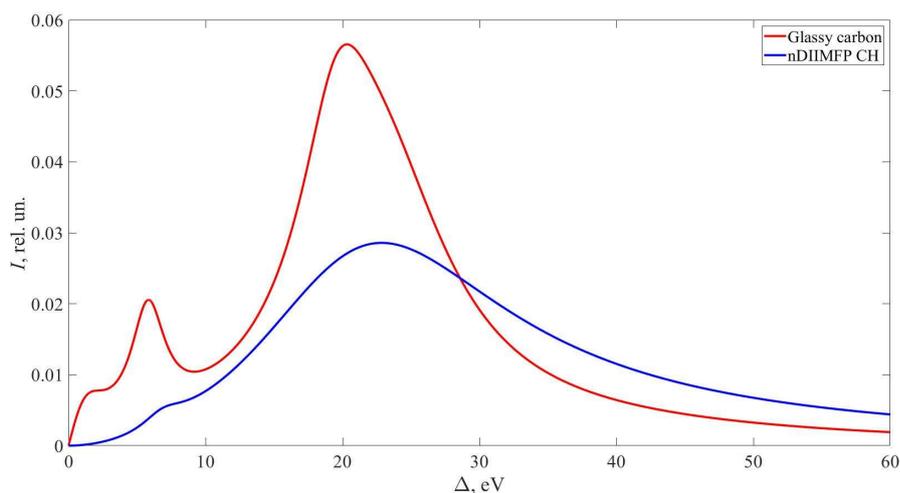


Рисунок 5.23 – Нормированное дифференциальное сечение неупругого рассеяния электронов в углеводородах (голубая линия) и стеклоуглероде (красная линия)

Сечение, представленное на рис. 5.23, было использовано для описания РФЭС спектров аморфных алмазоподобных кремний-углеродных пленок, приготовленных путем плазмохимического распыления полифенилметилсилоксана (ПФМС) [170].

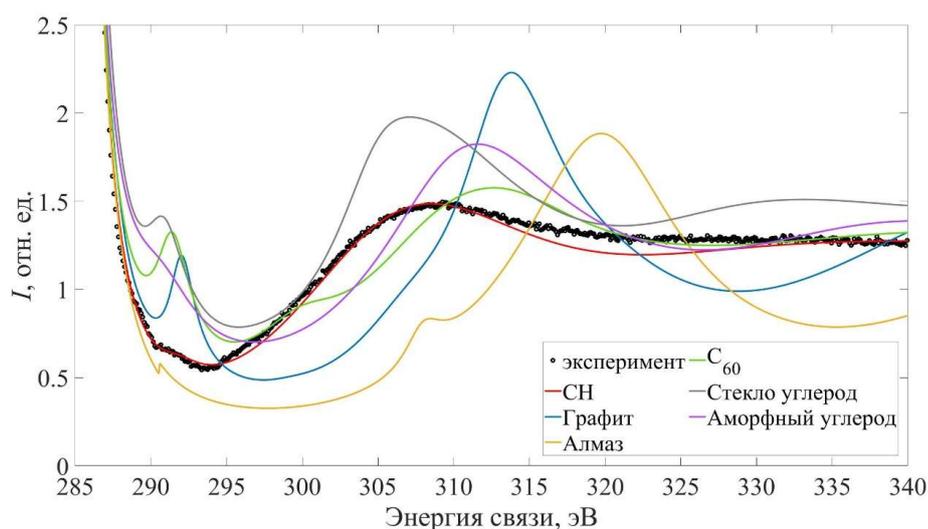


Рисунок 5.24 – Описание РФЭС спектра алмазоподобного покрытия в рамках PES анализа с использованием сечений для различных аллотропных форм углерода и сечения углеводородов

Рис. 5.24 демонстрирует высокое качество описания РФЭС спектра пленок с помощью сечения углеводородов. Различия в спектрах, построенных для различных аллотропных форм углерода, демонстрируют возможность однозначного определения аллотропной разновидности углерода на основе анализа области потерь энергии в спектрах РФЭС. Из результатов, представленных на рис. 5.24, следует, что алмазоподобные пленки представляют собой углеводородные пленки, в которых углерод находится в sp^3 гибридизации, в определенном соотношении с водородом.

Сечение для указанных углеводородов имеет максимум на энергии 22 эВ и заметно большую ширину плазмонного пика чем графит. Как отмечено выше дифференциальные сечения неупругих потерь энергии фотоэлектронов в углеводородах и алмазоподобных покрытиях практически одинаковы по форме. Структура алмазоподобного покрытия и стехиометрия углеводородной структуры определяется положением максимума сечения $x_{in}(\Delta)$.

Описание РФЭС спектров образца графита EAST с использованием сечения углеводородов (рис. 5.23), дало следующие результаты:

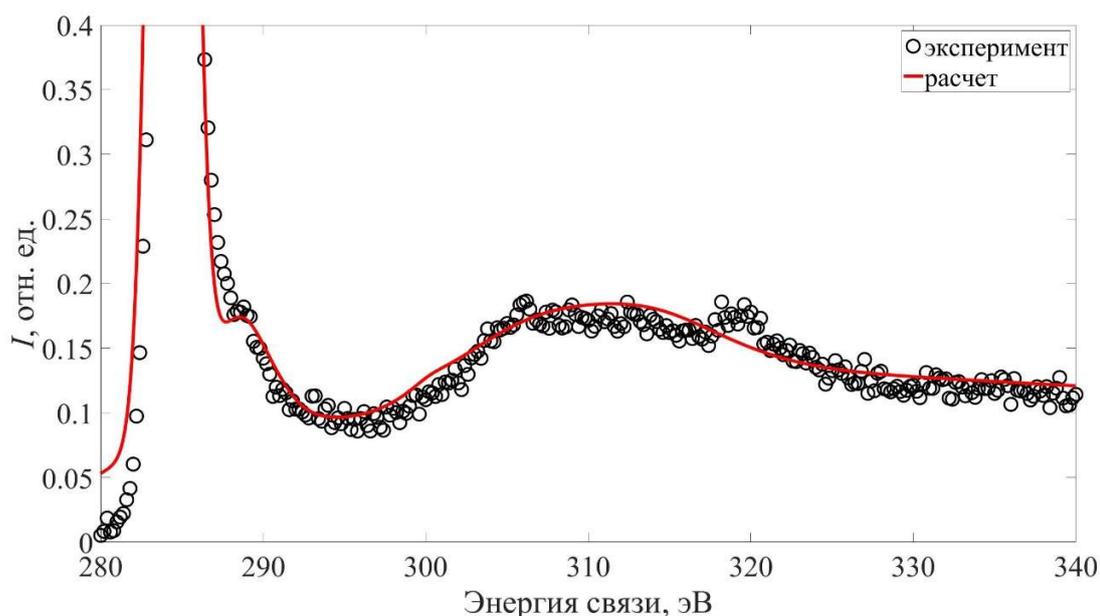


Рисунок 5.25 – Описание РФЭС спектра образца графита EAST в рамках PES методики с использованием сечения углеводородов

Таким образом можно утверждать, что основные изменения графитового образца, отработавшего семь лет в центральной области HFS токамака EAST, произошли в приповерхностной области. Стоит отметить, что в данном случае невозможно осуществить традиционный анализ, основанный на послойном распылении мишени ионами аргона, т.к. данный графит представляет собой пористый материал, степень пористости которого составляет 18%. Распыление ионами аргона приводит к появлению в порах углеродной пыли или аморфного углерода – иной аллотропной формы углерода, что резко меняет РФЭС спектр.

5.3.3.3 Физическая модель процесса образования алмазоподобных покрытий в токамаке EAST

Образцы графита, в течение многих лет используемые в качестве материала первой стенки токамака EAST, покрываются алмазоподобным слоем. Алмаз, обладая рекордно высокой теплопроводностью, является широко-зонным полупроводником с шириной запрещенной зоны 5.5 эВ. Электропроводность такого покрытия значительно меньше, чем электропроводность графита. Низкая электропроводность алмазоподобных структур и способность накапливать заряд приводит к проблемам при использовании их в качестве материала, обращенного к плазме.

Эффект роста на поверхности графита алмазоподобного слоя не является неожиданным фактом, несмотря на то, что алмаз является метастабильным состоянием углерода. Известно, что в термодинамически равновесной ситуации, в вакууме при температуре порядка 1300°C алмаз превращается в пиролитический графит, переходя из метастабильной в стабильную форму.

Рассмотрим процесс формирования алмазоподобной структуры. Под воздействием дейтериевой плазмы происходит заметное распыление графита. Порог распыления графита дейтерием составляет 28 эВ, коэффициент распыления для энергий дейтерия 100 – 200 эВ составляет величины 0.01 – 0.02. Распыленные атомы и ионы углерода начинают оседать на подложку из графита,

насыщенного дейтерием, по сути, на углеводородную подложку, на что указывает PES анализ поверхностей исходно графитовых покрытий. Подчеркнем, что в углеводородных покрытиях углерод находится в sp^3 гибридизации. Осаждение происходит в атмосфере дейтерия и в присутствии метана и метила, которые являются продуктами химического распыления графита [163]. Таким образом создаются все условия, описанные в работе [171], роста алмазоподобных пленок.

Графит марки МПГ-8, АТJ или GBST1308 является пористым материалом со степенью пористости порядка 18%. Хорошо известна способность пористых углеродных материалов к адсорбции контактирующих с ними газовых сред. Плазменное воздействие приводит к ускорению процесса хемосорбции изотопов водорода углеродной структурой.

Укажем на дополнительную возможность роста алмазоподобных пленок. Поверхность графита в токамаке EAST подвергается бомбардировке ионами дейтерия с энергией, достигающей сотен эВ. Пробеги ионов дейтерия с энергией 200 эВ в углероде составляют несколько нанометров, т.е. около десятка межатомных расстояний. При плазменном воздействии происходит субплантация ионов дейтерия в поверхность углеродного покрытия. Подробное исследование процесса субплантации ионов дейтерия в графит представлено в работе [162]. При этом в поверхностных слоях происходит рост углеводородных соединений, в которых углерод находится в sp^3 гибридизации. Потоки ионов дейтерия плазмы при взаимодействии с углеводородными покрытиями передают основную часть своей энергии равной им по массе водородной подсистеме, приводя как к распылению дейтерия в углеводородах, так и к процессу радиационно-стимулированной диффузии дейтерия по углеродной и углеродной структуре. Преимущественное распыление дейтерия в поверхностных углеводородных структурах приводит к удалению их них дейтерия, углеродные структуры остаются в состоянии sp^3 гибридизации, образуя алмазоподобные покрытия на углеводородной подложке.

5.3.3.4 Исследование графита марки МПГ-8 на ПЛМ

Результаты, полученные для образца графита EAST, кардинально меняют представление о процессах, происходящих с поверхностью графита в условиях воздействия термоядерной плазмы. Исследования, проведенные ранее с образцом графита марки МПГ-8, облученным гелиевой плазмой на плазменно-линейной установке (ПЛМ) с параметрами, имитирующими пристеночную плазму термоядерных реакторов, показали, что поверхность графита переходит в структуру пиролитического графита.

Эксперимент: плазменная обработка трех графитовых образцов марки МПГ-8 размером 8x8x4 мм выполнена на установке ПЛМ в «НИУ «МЭИ». Время плазменного воздействия на образцы МПГ-8 – 65 мин. Доза (флюенс) ионов гелия до 3×10^{25} ионов/м². Температура поверхности образцов по показаниям пирометра: $t = 480^\circ\text{C}$ (для образца № 2), $t = 650^\circ\text{C}$ (для образца № 3), $t = 800^\circ\text{C}$ (для образца № 4). Образец № 1 – необработанный плазмой образец МПГ-8.

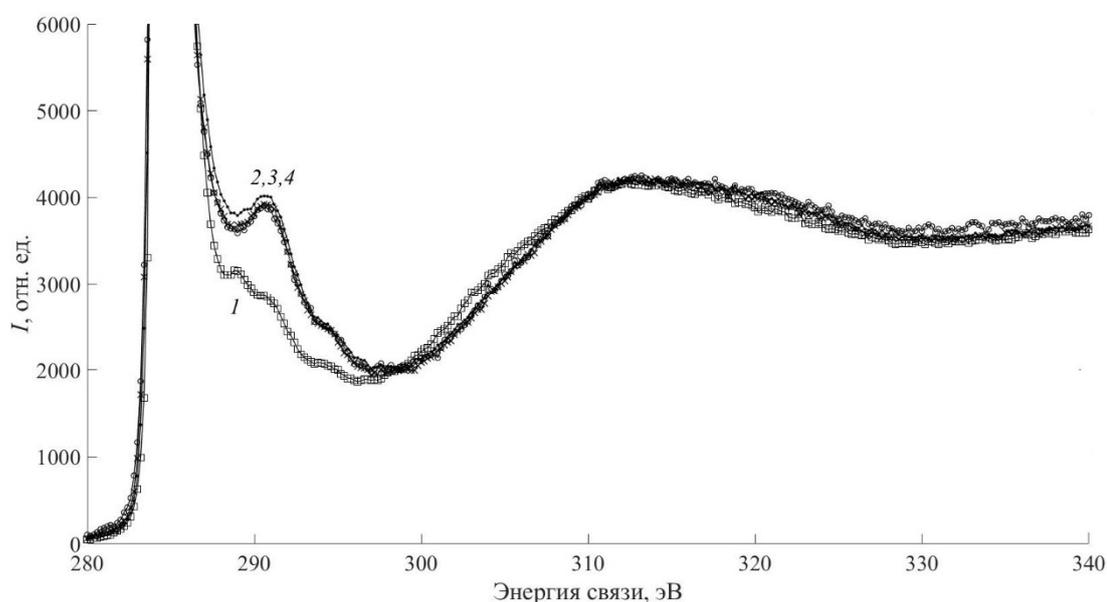


Рисунок 5.26 – РФЭС спектр МПГ-8; (1) – необработанный плазмой образец; (2)-(4) – обработанные плазмой образцы

На рис. 5.26 представлены РФЭС спектры четырех образцов графита марки МПГ-8. Рис. 5.26 демонстрирует изменение РФЭС спектров в области малых потерь энергии (3-15 эВ), происходящих в результате плазменного воздействия при разных температурных режимах, причем данные изменения не зависят от величины плазменной нагрузки. Данная область потерь энергии сформирована фотоэлектронами, потерявшими энергию на возбуждение π -плазмонных колебаний величиной 7 эВ. Явно виден пик на 10 эВ. Рис. 5.26 указывает, что область энергетического спектра, в которой наблюдаются существенные различия, находится в интервале потерь энергии от 0 до ~ 15 эВ.

Для того чтобы однозначно определить электронную структуру исследуемых материалов и определенно утверждать, что из себя представляют обработанные плазмой образцы, необходимо восстановить вид дифференциального сечения неупругого рассеяния электронов в рассматриваемом материале, которое является однозначной характеристикой того или иного материала.

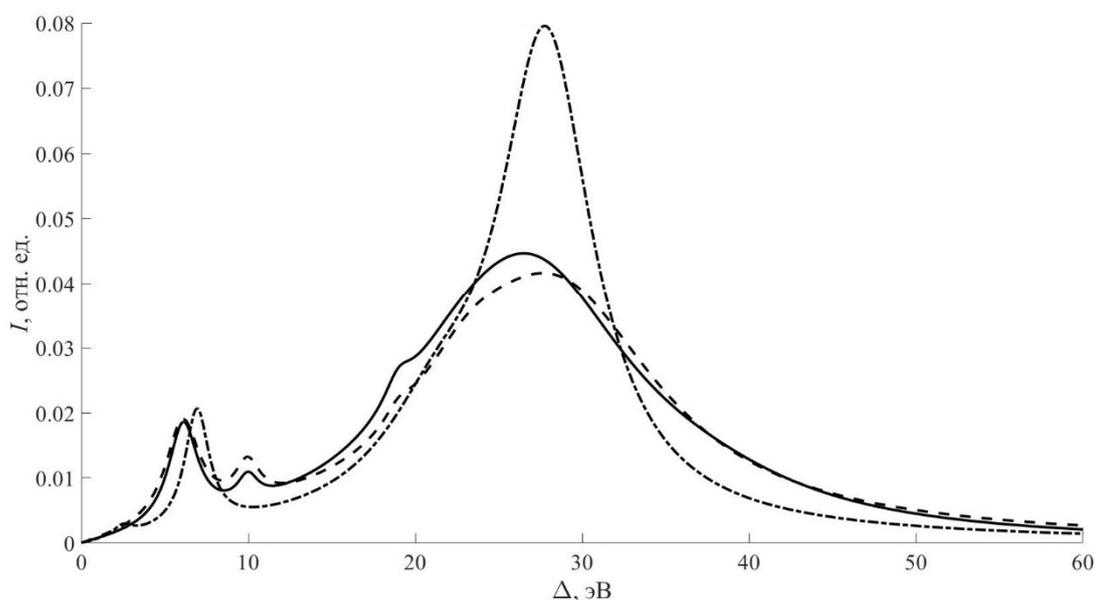


Рисунок 5.27 – Восстановленные дифференциальные сечения неупругого рассеяния электронов в МПГ-8 (сплошная линия); графите [167] (штрихпунктирная линия); ВОПГ (штриховая линия)

На рис. 5.27 представлены дифференциальные сечения неупругого рассеяния электронов, восстановленные из измеренных РФЭС спектров для образца № 4 МПГ-8 (сплошная линия) и высоко ориентированного пиролитического графита (ВОПГ) в случае его зондирования по нормали к поверхности (штриховая линия), а также сечение графита, полученное в работе [167] (штрихпунктирная линия). Рис. 5.27 демонстрирует качественные и количественные различия в представленных сечениях: отсутствие возбуждения на энергии 10 эВ в сечении, полученном из работы [167], сдвиг π и $\pi+\sigma$ -плазмонного пика в область меньших потерь энергии для восстановленных в данной работе сечений. Рис. 5.27 позволяет однозначно утверждать, что поверхность обработанного плазмой образца МПГ-8 и поверхность высоко ориентированного пиролитического графита имеют одинаковую электронную структуру.

5.3.3.5 Выводы по пункту 5.3.3

Представленные результаты, в том числе результаты PES анализа, показывают, что воздействие дейтериевой плазмы на графит в условиях токамака EAST приводит к созданию диэлектрической поверхности с высоким омическим сопротивлением, что является единственной проблемой для его использования в качестве материала первой стенки.

Для улучшения характеристик графита, необходимых для обращенного к плазме материала, его поверхность покрывалась 10 нм слоем карбида кремния, что приводило к образованию более температурно устойчивых кремний углеродных алмазных покрытий. В работе [166] представлены исследования, указывающие на возможность сделать данные покрытия проводящими. Учитывая значительно более высокую теплопроводность алмаза по сравнению с графитом, придание покрытию удовлетворительной электропроводности позволит получить материал, который будет обладать всеми свойствами, необходимыми для материала первой стенки. Например, известно, что наличие

в алмазоподобных пленках более 6% титана приводит к повышению электропроводности на 6 порядков [172].

В работах [173,174] было показано, что проницаемость (коэффициент пропорциональности между плотностью потока водорода и градиентом концентрации водорода) графита на 4 порядка выше, чем проницаемость алмазоподобных покрытий. Таким образом наличие алмазоподобных покрытий положительно сказывается на процессе рециклинга в токамаке.

В работах [162,163,171,175–177] исследуется процесс распыления некоторых графитов, включая как физическое, так и химическое распыление. Рассматриваются образцы мелкозернистого графита марки АТJ и образцы пиролитического графита. Отмечается резкое влияние процесса обработки образцов плазмой на коэффициент распыления. Указывается на более низкий коэффициент распыления пиролитического графита. В связи с вышесказанным возникает вопрос о коэффициенте распыления алмазоподобных структур, обсуждаемых в работе. Известно, что коэффициент физического распыления алмаза ниже, чем графита. Учитывая факт высокой химической стойкости алмаза, можно предположить, что и суммарный коэффициент распыления (включая химическое распыление) будет заметно ниже, чем коэффициент распыления графитов, рассмотренных в работах [162, 175–177].

Проведенное исследование указало на высокую интенсивность плазмохимических процессов, происходящих с поверхностью обращенных к плазме мелкозернистых прочных графитовых покрытий. Факт присутствия малого количества Si в поверхностных слоях, с учетом того, что графит изначально был покрыт слоем карбида кремния SiC толщиной 0.2 мм, говорит о макромасштабах процессов эрозии, происходящих с материалами. В процессе формирования алмазоподобных покрытий важную роль играет комплекс процессов: физическое и химическое распыление, осаждение распыленного углерода в атмосфере метана, метила и радикалов CH_n , наличие углеводородных

поверхностей. Пористая структура поверхности графита ведет к формированию резко неоднородной структуры создающегося покрытия.

Имея значительно меньший коэффициент физического распыления и кратно меньший коэффициент химического распыления, алмазоподобное покрытие обладает целым рядом достоинств по сравнению с графитом как материал первой стенки. Данные преимущества позволяют предотвратить тритиевую проблему, возникающую при использовании углеродных и углеводородных покрытий.

5.4 Основные результаты и выводы пятой главы

Воздействие плазмы на обращенные к ней материалы приводит к модификации поверхности: внедрение частиц плазмы в материалы, распыление поверхности, образование покрытий и т.д. В настоящей работе исследовалось влияние плазменной обработки на электронную структуру и диэлектрическую проницаемость, изменение химических связей графитовых и вольфрамовых материалов. Изучить влияние воздействия плазмы на поверхности исследуемые материалы возможно, анализируя набор РФЭС спектров, измеренных до и после плазменной обработки, включая наряду с рассмотрением пиков область потерь энергии, примыкающую к пикам.

Область потерь энергии, примыкающая к пикам, сформированным фотоэлектронами, вышедшими в вакуум без неупругих потерь энергии, содержит информацию, позволяющую определить дифференциальное сечение неупругого рассеяния электронов $\chi_{in}(\Delta)$, являющееся мнимой частью диэлектрической проницаемости исследуемого материала, которую принято связывать с аллотропной разновидностью данного образца.

Пики в спектрах РФЭС формируют фотоэлектроны, вышедшие в вакуум без потерь энергии, средний пробег которых в материале составляет величину l_{in} . Информационная глубина традиционного РФЭС исследования, основанного на анализе пиков, или Peak Shape Analysis составляет величину $(2-3)l_{in}$. Анализ

области потерь энергии (Photo Electron Spectra analysis), примыкающей к пику, сформированной фотоэлектронами, многократно рассеявшимися в материале, позволяет значительно увеличить информационную глубину зондирования мишени. Представленная в настоящей работе аналитическая методика позволяет решить прямую задачу определения энергетических РФЭС спектров на основе данных упругого и неупругого рассеяния электронов и обратную задачу восстановления дифференциального сечения неупругого рассеяния электронов, однозначно определяющего аллотропную структуру рассматриваемого материала, на основе процедуры подбора расчетного и экспериментального энергетического спектра.

Заключение

Проведенные в рамках диссертационной работы исследования позволяют сделать следующие 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, описывающие 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:

А1 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: KQVHAD. Импакт-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. Импакт-фактор 0.4 (JIF). Авт. вклад 0.4 из 0.7 п.л.

А2 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. Импакт-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. Импакт-фактор 0.253 (SJR). Авт. вклад 0.4 из 0.7 п.л.

А3 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. Импакт-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. Импакт-фактор 0.194 (SJR). Авт. вклад 0.6 из 1.2 п.л.

А4В.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: ВКНАРН. Импакт-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. Импакт-фактор 0.4 (JIF). Авт. вклад 0.4 из 0.7 п.л.

А5В.П. Афанасьев, Г.С. Боcharov, А.В. Елетский, Л.Г. Лобанова, К.И. Маслаков, С.В. Савилов. Comparative Investigation of XPS Spectra of Oxidated Carbon Nanotubes and Graphene // Biophysica. 2023. V. 3. № 2. P. 307 – 317. EDN: XDPOMY. Импакт-фактор 1.4 (JIF). Авт. вклад 0.4 из 1.3 п.л.

А6В.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. Импакт-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.

- A7В.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.
- A8В.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.
- A9V.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. Eletsii, 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 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., Nakajima K., Yamanaka S., Hasegawa M., Okushi H. 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. Chwolson O. Grundzüge einer mathematischen Theorie der inneren Diffusion des Lichtes // Bull. Acad. Imp. Sci. St Pétersb Bd., 1889, 33, P. 221 – 256
18. Чандрасекар С. Перенос лучистой энергии. М.: ИЛ, 1953. – 462 с.
19. Амбарцумян В.А. // ЖЭТФ, 1943, Т. 13, № 9-10, С. 244.
20. Eyges L. Multiple Scattering with Energy Loss // Phys. Rev., 1948, V. 74, No. 10, P. 1534 – 1535. <https://doi.org/10.1103/PhysRev.74.1534>
21. Moliere G. Theorie der Streuung Schneller Geladener Teilchen II Mehrfach- ung Veilfachstreuung // Z. Naturforsch., 1948, V. 3, No. 2, P. 78 – 97. <https://doi.org/10.1515/zna-1948-0203>
22. Bethe H.A. Moliere's Theory of Multiple Scattering // Phys. Rev., 1953, V. 89, No. 6, P. 1256 – 1266. <https://doi.org/10.1103/PhysRev.89.1256>
23. Bohr N. The penetration of atomic particles through matter. I kommission hos E. Munksgaard, 1948. – 144 p.

24. Chi W.K., Mayer J.M., Nicolet M.A. Backscattering Spectrometry. New York: Academic Press, 1978. – 384 p.
25. Dashen R.F. Theory of Electron Backscattering // Phys. Rev., 1964, V. 134, P. 1025 – 1032. <https://doi.org/10.1103/PhysRev.134.A1025>
26. Афанасьев В.П. Элементарные процессы и кинетика высокотемпературной неравновесной плазмы // Учебное пособие по курсам Физика плазмы и управляемый термоядерный синтез, Экспериментальные термоядерные установки. М.: Моск. энерг. ин-т., 1988. – 84 с.
27. Афанасьев В.П. Взаимодействие потоков электронов и легких ионов со слоисто-неоднородными мишенями : специальность 01.04.04. – Физическая электроника : диссертация на соискание ученой степени доктора физико-математических наук / Афанасьев Виктор Петрович ; Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова. – Москва, 2002. – 271 с.
28. Тилинин И.С. // Поверхность. Физика, химия, механика, 1983, No. 3, С. 10 – 18.
29. Фирсов О.Б. // Докл. АН СССР. Сер. Физ., 1966, Т. 169, С. 1311 – 1313.
30. Фирсов О.Б. // ЖЭТФ, 1971, Т. 61, С. 1452 – 1462.
31. Машкова Е.С, Молчанов В.А. Рассеяние ионов средних энергий поверхностями твердых тел. М.: Атомиздат, 1980. – 256 с.
32. Eckstein W., Biersack J.P. The reflection of light swift particles from heavy solid targets // Z. Phys. A: Atoms and Nuclei, 1983, V. 310, P. 1 – 8. <https://doi.org/10.1007/BF01433604>
33. Parilis E.S., Verleger V.K. – J. Nucl. Mater., 1980, V. 93/94, P. 512 – 517.
34. Eckstein W., Molchanov V.A., Verbeek H. The charge states of He and Ne backscattered from Ni in the energy range of 1.5–15 keV // Nucl. Instrum. and Methods, 1978, V. 149, No. 1-3, P. 599 – 604. [https://doi.org/10.1016/0029-554X\(78\)90935-7](https://doi.org/10.1016/0029-554X(78)90935-7)

35. Afanas'ev V.P., Pavlenko S.V. Backscattering of megaelectronvolt electrons // *Z. Physik B - Condensed Matter*, 1994, V. 93, P. 357 – 363. <https://doi.org/10.1007/BF01312707>
36. Ремизович В.С., Рязанов М.И., Тилинин И.С. // Докл. АН СССР. Сер. Физ., 1980, Т. 251, С. 848 – 851.
37. Ремизович В.С., Рязанов М.И., Тилинин И.С. Докл. АН СССР. Сер. Физ., 1980, Т. 254, С. 616 – 619.
38. Mashkova E.S., Remizovich V.A., Snisar V.A., Ryazanov M.I., Tilinin I.S. Small-angle particle reflection from random solids: Theory and experiment // *Radiat. Eff.*, 1983, V. 70, P. 85 – 105.
39. Archard G.D. Back Scattering of Electrons // *J. Appl. Phys.*, 1961, V. 32, No. 8, P. 1505 – 1509. <https://doi.org/10.1063/1.1728385>
40. Tomlin S.G. The Back-scattering of Electrons from Solids // *Proc. Phys. Soc.*, 1963, V. 82, P. 465. <https://doi.org/10.1088/0370-1328/82/3/118>
41. Borodyansky S., Tougard S. Study of electron backscattering within the approximation of discrete flows // *Surf. Interface Anal.*, 1995, V. 23, No. 10, P. 689 – 695. <https://doi.org/10.1002/sia.740231007>
42. Biersack J.P., Haggmark L.G. A Monte Carlo computer program for the transport of energetic ions in amorphous targets // *Nucl. Instrum. Methods*, 1980, V. 174, No. 1-2, P. 257 – 269. [https://doi.org/10.1016/0029-554X\(80\)90440-1](https://doi.org/10.1016/0029-554X(80)90440-1)
43. Biersack J.P., Eckstein W. Sputtering studies with the Monte Carlo Program TRIM.SP // *Appl. Phys. A*, 1984, V. 34, P. 73 – 94. <https://doi.org/10.1007/BF00614759>
44. Robinson M.T., Torrens I.M. Computer simulation of atomic-displacement cascades in solids in the binary-collision approximation // *Phys. Rev. B*, 1974, V. 9, P. 5008. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.9.5008>
45. Shulga V.I. Computer simulation of single-crystal and polycrystal sputtering I // *Radiat. Eff.*, 1983, V. 70, No. 1-4, P. 65 – 83. <https://doi.org/10.1080/00337578308219206>

46. Бериш Р., Зигмунд П., Робинсон М. и др. Распыление твердых тел ионной бомбардировкой: Физ. распыление одноэлемент. твердых тел / Под ред. Р. Бериша. М: Мир, 1984. – 336 с.
47. Черныш В.С., Иешкин А.Е., Балакшин Ю.В., Шемухин А.А. Методы ионно-пучкового анализа поверхности твердых тел / Под ред. В.С. Черныша. – М.: Физический факультет МГУ им. М.В. Ломоносова, 2025. – 294 с.
48. Нефедов В.И., Черепин В.Т. Физические методы исследования поверхности твердых тел. М.: Наука, 1983. – 296 с.
49. Черепин В.Т. Масс-спектрометрия вторичных ионов // Электронная промышленность, 1979, No. 1-2, С. 17 – 34.
50. Grasserbauer M., Stinger G. Secondary ion mass spectrometry (SIMS) of silicon // Vacuum, 1989, V. 39, No. 11-12, P. 1077 – 1087. [https://doi.org/10.1016/0042-207X\(89\)91096-8](https://doi.org/10.1016/0042-207X(89)91096-8)
51. Coad J.P., Simpson J.C.B., Neill G.F. Combination of ion beam techniques, AES and SIMS for the analysis of samples exposed in the plasma boundary of the JET tokamak // Surf. Interface Anal., 1989, V. 14, No. 9, P. 543 – 551. <https://doi.org/10.1002/sia.740140909>
52. Rozenak P., Ladna B., Birnbaum H.K. SIMS study of deuterium distribution in chemically charged aluminum containing oxide layer defects and trapping sites // Journal of Alloys and Compounds, 2006, V. 415, No. 1-2, P. 134 – 142. <https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2005.08.031>
53. Кузьмин А.А., Айрапетов А.А., Беграмбеков Л.Б., и др. Исследование захвата и удержания изотопов водорода в тайлах токамака Tore Supra // Вопросы атомной науки и техники. Серия: Термоядерный синтез, 2009, No. 3, С. 30 – 34.
54. Campresi R., Cuevas F., Cadiou R., et al. Hydrogen storage properties of DP nanoparticle/carbon template composites. // Carbon, 2008, V. 46, No. 2, P. 206 – 214. <https://doi.org/10.1016/j.carbon.2007.11.006>

55. Pisarev A., Tanabe T., Emmoth E., et al. Deuterium accumulation in carbon materials at high fluence // J. Nucl. Mater., 2009, V. 390-391, P. 677 – 680. <https://doi.org/10.1016/j.jnucmat.2009.01.186>
56. Temmerman G.De, Doerner R.P. Deuterium retention and release in tungsten co-deposited layers // J. Nucl. Mater., 2009, V. 389, No. 3, P. 479 – 483. <https://doi.org/10.1016/j.jnucmat.2009.03.028>
57. Yoshida M., Tanabe T., Nobuta Y., et al. Hydrogen isotope retention in the outboard first wall of JT-60U // J. Nucl. Mater., 2009, V. 390-391, P. 635 – 638. <https://doi.org/10.1016/j.jnucmat.2009.01.177>
58. Friedrich M., Pilz W., Sun G, et al. Tritium depth profiling in carbon samples from fusion experiments // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res., Sect. B, 2000, V. 172, No. 1-4, P. 655 – 658. [https://doi.org/10.1016/S0168-583X\(00\)00099-9](https://doi.org/10.1016/S0168-583X(00)00099-9)
59. Becker HW., Rogalla D. (2016). Nuclear Reaction Analysis. In: Fritzsche, H., Huot, J., Fruchart, D. (eds) Neutron Scattering and Other Nuclear Techniques for Hydrogen in Materials. Neutron Scattering Applications and Techniques. Springer, Cham. https://doi.org/10.1007/978-3-319-22792-4_11
60. Dittmar T., Tsitrone E., Pégourié B., et al. Deuterium Inventory in Tore Supra (DITS): 2nd post-mortem analysis campaign and fuel retention in the gaps // J. Nucl. Mater., 2011, V. 415, No. 1, P. S757 – S760. <https://doi.org/10.1016/j.jnucmat.2010.11.075>
61. Ogorodnikova O.V., Sugiyama K., Schwarz-Selinger T., et al. Ion-induced deuterium retention in tungsten coatings on carbon substrate // J. Nucl. Mater., 2011, V. 419, No. 1-3, P. 194 – 200. <https://doi.org/10.1016/j.jnucmat.2011.07.023>
62. Wright G.M., Westerhout J., Ala R.S., et al. Materials research under ITER-like divertor conditions at FOM Rijnhuizen // J. Nucl. Mater., 2011, V. 417, No. 1-3, P. 457 – 462. <https://doi.org/10.1016/j.jnucmat.2010.12.209>
63. Khodja H., Brosset C., Bernier N. Deuterium inventory in plasma facing materials by mean of NRA: microbeam probe approach // Nucl. Instrum. Methods

Phys. Res., Sect. B, 2008, V. 266, No. 8, P. 1425 – 1429.

<https://doi.org/10.1016/j.nimb.2007.11.027>

64. Kubota N., Ochiai K., Kutsukake C., et al. Ion and Neutron Beam Analyses of Hydrogen Isotopes // Fusion Eng. Des., 2006, V. 81, No. 1-7, P. 227 – 231.

<https://doi.org/10.1016/j.fusengdes.2005.09.022>

65. Umezawa K., Yamane J., Kuroi T., et al. Nuclear reaction analysis and elastic recoil detection analysis of the retention of deuterium and hydrogen implanted into Si and Ga-As crystals // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res., Sect. B, 1988, V. 33, No. 1-4, P. 638 – 640. [https://doi.org/10.1016/0168-583X\(88\)90648-9](https://doi.org/10.1016/0168-583X(88)90648-9)

66. Verbeeck J., Bertoni G. Model-based quantification of EELS spectra: Treating the effect of correlated noise // Ultramicroscopy, 2008, V. 108, No. 2, P. 74 – 83. <https://doi.org/10.1016/j.ultramic.2007.03.004>

67. Yubero F., Tougaard S. Model for quantitative analysis of reflection-electron-energy-loss spectra // Phys. Rev. B: Condens. Matter, 1992, V. 46, No. 4, P. 2486 – 2497. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.46.2486>

68. Yubero F., Sanz J.M., Ramskov B., Tougaard S. Model for quantitative analysis of reflection-electron-energy-loss spectra: Angular dependence // Phys. Rev. B: Condens. Matter, 1996, V. 53, No. 15, P. 9719 – 9727. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.53.9719>

69. Vikanek M. Electron transport processes in reflection electron energy loss spectroscopy (REELS) and X-ray photoelectron spectroscopy (XPS) // Surf. Sci., 1999, V. 440, No. 1-2, P. 1 – 40. [https://doi.org/10.1016/S0039-6028\(99\)00784-0](https://doi.org/10.1016/S0039-6028(99)00784-0)

70. Афанасьев В.П., Грязев А.С., Капля П.С., Андреева Ю.О., Головина О.Ю., Спектры характеристических потерь энергии ниобия, дифференциальные сечения неупругих потерь энергии и рентгеновские фотоэлектронные спектры с угловым разрешением // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования, 2016, No. 1, С. 73 – 79. <https://doi.org/10.7868/S0207352815120021>

71. Werner W.S.M. Obtaining quantitative information on surface excitations from reflection electron energy loss spectra (REELS) // Surf. Interface Anal., 2003, V. 35, No. 4, P. 347 – 353. <https://doi.org/10.1002/sia.1540>
72. Werner W.S.M., Eisenmenger-Sittner C., Zemek J., et al. Scattering angle dependence of the surface excitation probability in reflection electron energy loss spectra // Phys. Rev. B, 2003, V. 67, P. 155412. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.67.155412>
73. Afanas'ev V., Lubenchenko A., Gubkin M. Quantitative interpretation of EELS and REELS spectra // Eur. Phys. J. B, 2004, V. 37, P. 117 – 125. <https://doi.org/10.1140/epjb/e2004-00036-x>
74. Афанасьев В.П., Ефременко Д.С., Лубенченко А.В. и др. Восстановление сечений неупругого рассеяния из энергетических спектров отраженных атомных частиц // Известия РАН. Серия Физическая, 2010, Т. 74, No. 2, С. 189 – 193.
75. Афанасьев В.П. Электронная и ионная спектроскопия твердых тел: учебное пособие / В.П. Афанасьев. М.: Издательство МЭИ, 2005. –56 с.
76. Afanas'ev V.P., Fedorovich S.D., Lubenchenko A.V., et al. Kilovolt electron backscattering // Z. Physik B - Condensed Matter, 1994, V. 96, P. 253 –256. <https://doi.org/10.1007/BF01313291>
77. Fujikawa T., Suzuki R., Kover L. Theory of recoil effects of elastically scattered electrons and photoelectrons // J. Electron. Spectrosc. Relat. Phenom., 2006, V. 151, No. 3, P. 170 – 177. <https://doi.org/10.1016/j.elspec.2005.11.011>
78. Went M.R., Vos M. Electron Rutherford back-scattering case study: oxidation and ion implantation of aluminium foil // Surf. Interface Anal., 2007, V. 39, No. 11, P. 871 – 876. <https://doi.org/10.1002/sia.2603>
79. Vos M., Aizel K., Winkelmann A. Experimental observation of the strong influence of crystal orientation of Electron Rutherford Backscattering Spectra // Surf. Sci., 2010, V. 604, No. 11-12, P. 893 – 897. <https://doi.org/10.1016/j.susc.2010.02.016>

80. Vos M., Cornish G.P., Weigold E. High-energy (e , $2e$) spectrometer for the study of the spectral momentum density of materials // *Rev. Sci. Instrum.*, 2000, V. 71, No. 10. P. 3831 – 3840. <https://doi.org/10.1063/1.1290507>
81. Vos M., Went M.R. Elastic electron scattering at high momentum transfer: A possible new analytic tool // *J. Electron. Spectrosc. Relat. Phenom.*, 2007, V. 155, No. 1-3, P. 35 – 39. <https://doi.org/10.1016/j.elspec.2006.09.003>
82. Afanas'ev V.P., Bodisko Yu.N., Gryazev A.S., Efremenko D.S., Kaplya P.S. Quantitative Interpretation of Electron Spectroscopy Signals. Extracting the Differential Inverse Inelastic Mean Free Path and Differential Surface Excitation Probability in Solids // *J. Surf. Invest.: X-Ray, Synchrotron Neutron Tech.*, 2020, V. 14, No. 6. P. 1324 – 1341. <https://doi.org/10.1134/S102745102006021X>
83. Kostanovskiy I.A., Afanas'ev V.P., Naujoks D., Mayer M. Hydrocarbon isotope detection by elastic peak electron spectroscopy // *J. Electron. Spectrosc. Relat. Phenom.*, 2015, V. 202, P. 22 – 25. <https://doi.org/10.1016/j.elspec.2015.02.008>
84. Афанасьев В.П., Грязев А.С., Капля П.С., Корпен М., Рыбакова А.В. Определение концентрации дейтерия, имплантированного в бериллий, на основе спектроскопии пиков упруго отраженных электронов // *Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования*, 2019, № 9, С. 44 – 48. <https://doi.org/10.1134/S0207352819090026>
85. Afanas'ev V.P., Gryazev A.S., Kaplya P.S., Ridzel O.Yu., Rybakova A.V. Analysis of XPS and REELS spectra of beryllium // *Journal of Physics: Conference Series*, 2019, V. 1370, P. 012063. <https://doi.org/10.1088/1742-6596/1370/1/012063>
86. Tanuma S., Powell C.J., Penn D.R. Calculations of electron inelastic mean free paths // *Surf. Interface Anal.*, 2005, V. 37, No. 1, P. 1 – 14. <https://doi.org/10.1002/sia.1997>
87. Gergely G. Elastic peak electron spectroscopy // *Scanning*, 1986, V. 8, No. 5, P. 203 – 214. <https://doi.org/10.1002/sca.4950080503>

88. Dubus A., Jablonski A., Tougaard S. Evaluation of theoretical models for elastic electron backscattering from surfaces // Prog. Surf. Sci., 2000, V. 63, No. 6, P. 135 – 175. [https://doi.org/10.1016/S0079-6816\(99\)00018-0](https://doi.org/10.1016/S0079-6816(99)00018-0)
89. Бронштейн И.М., Пронин В.П., Хинич И.И. и др. Спектроскопия упругого отражения электронов как эффективный метод диагностики поверхности твердого тела // Известия Российского государственного педагогического университета им. А.И. Герцена, 2006, Т. 6, No. 15, С. 151 – 165.
90. Пронин В.П., Хинич И.И., Чистотин И.А. Спектроскопия упругого отражения электронов для количественного элементного анализа поверхности твердого тела // Письма в ЖТФ, 2008, Т. 34, No. 19, С. 21 – 26.
91. Jablonski A., Zemek J. Angle-resolved elastic peak electron spectroscopy: Role of surface excitations // Surf. Sci., 2007, V. 601, No. 16, P. 3409 – 3420. <https://doi.org/10.1016/j.susc.2007.05.064>
92. Zemek J., Jiricek P., Werner W.S.M., et al. Angular-resolved elastic peak electron spectroscopy: experiment and Monte Carlo calculations // Surf. Interface Anal., 2006, V. 38, No. 4, P. 615 – 619. <https://doi.org/10.1002/sia.2147>
93. Бронштейн И.М., Пронин В.П. Упругое отражение электронов средних энергий от твердых тел // Физика Твердого Тела, 1975, Т. 17, No. 7, С. 2086 – 2088.
94. Артемьев В.П., Макаров В.В., Петров Н.Н. О возможностях применения метода резерфордского обратного рассеяния электронов для исследования приповерхностных слоев твердых тел // Известия Академии Наук СССР. Серия Физическая, 1985, Т. 49, No. 9, С. 1765 – 1769.
95. Афанасьев В.П., Афанасьев М.В., Лисов А.А. и др. Измерение изотопного состава водорода в углеродных материалах на основе спектроскопии пиков упругорассеянных электронов // Журнал технической физики, 2009, Т. 79, No. 11, С. 106 – 112.

96. Фелдман Л., Майер Д. Основы анализа поверхности и тонких пленок / Пер. с англ. М.: Мир, 1989. –342 с.
97. Оура К. Введение в физику поверхности. М.: Наука, 2006. – 460 с.
98. Powell C.J. Jablonskiy A. progress in quantative surface analysis by X-ray photoelectron spectroscopy: current status and perspectives //Journal of electron spectroscopy and related phenomena, 2010. Vol. 178-179. P. 331-346
99. Briggs D., Grant J.T. Surface Analysis by Auger and X-Ray Photoelectron Spectroscopy, Chichester, IM Publ., 2003. – 899 p.
100. CasaXPS. — URL: <http://www.casaxps.com>
101. Wolfgang S. M. Werner. PHYSICAL REVIEW B VOLUME 55, NUMBER 22
102. Wolfgang S. M. Werner*Surf. Interface Anal. 2001; 31
103. Afanas'ev, V.P., Kaplya P.S., Lisitsyna E.D. Small-Angle Approximation and Oswald-Kasper-Gaukler Theory of Electron Reflection from Solids // J. Surf. Invest.: X-Ray, Synchrotron Neutron Tech., 2016, V. 10, No. 2, P. 326 – 331. <https://doi.org/10.1134/S1027451016010043>
104. 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>
105. Salvat-Pujol F., Werner W.S.M. Oswald-Kasper-Gaukler model for reflection electron energy loss spectrometry // Phys. Rev. B: Condens. Matter., 2011, V. 83, No. 19, P. 195416. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.83.195416>
106. Brode R.B. The Quantitative Study of the Collisions of Electrons with Atoms // Reviews of Modern Physics, 1933, V. 5, No. 4, P. 257 – 279. <https://doi.org/10.1103/RevModPhys.5.257>
107. Ландау, Л. Д. Собрание трудов : науч. изд. Т. 1 / Л. Д. Ландау. – Москва : Наука, 1969. – 510 с.

108. Afanas'ev V.P., Gryazev A.S., Efremenko D.S., Kaplya P.S., Lyapunov N.V. Differential Inverse Inelastic Mean Free Path Determination on the Base of X-Ray Photoelectron Emission Spectra // J. Surf. Invest.: X-Ray, Synchrotron Neutron Tech., 2016, V. 10, No. 5, P. 906 – 911. <https://doi.org/10.1134/S1027451016050037>
109. Ridzel O. Yu., Kalbe H., Astašauskas V., Kuksa P., Bellissimo A., Werner W.S.M. Optical constants of organic insulators in the UV range extracted from reflection electron energy loss spectra // Surf. Interface Anal., 2022, V. 54, No. 5, P. 487 – 500. <https://doi.org/10.1002/sia.7055>
110. 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
111. Zemek J., Jiricek P., Werner W.S.M., Lesiak B., Jablonski A. Angular-resolved elastic peak electron spectroscopy: experiment and Monte Carlo calculations // Surf. Interface Anal., 2006, V. 38, No. 4, P. 615 – 619. <https://doi.org/10.1002/sia.2147>
112. Afanas'ev V.P., Budak V.P., Efremenko D.S., Lubenchenko A.V. Angular Distributions of Electrons and Light Ions Elastically Reflected from a Solid Surface // J. Surf. Invest.: X-Ray, Synchrotron Neutron Tech., 2010, V. 4, No. 3, P. 488 – 493. <https://doi.org/10.1134/S1027451010030213>
113. Bronshtein I.M., Pronin V.P. Elastic reflection of mean energy electrons from solids // Phys. Solid State, 1975, No. 7, P. 2086 – 2088
114. Lobanova L.G., Wang S., Lian H., Cui X., Chen J., Yan R., Zhang L., Afanas'ev V.P., Liu H. 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. <https://doi.org/10.1016/j.nme.2025.101938>

115. 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)
116. Ding Z. -J., Shimizu R., Goto K. Background formation in the low-energy region in Auger electron spectroscopy // J. Appl. Phys., 1994, V. 76, No. 2, P. 1187 – 1195. <https://doi.org/10.1063/1.357844>
117. Goto K., Sakakibara N., Takeichi Y., Sakai Y. True Auger spectral shapes: A step to standard spectra // Surf. Interface Anal., 1994, V. 22, No. 1-2, P. 75 – 78. <https://doi.org/10.1002/sia.740220119>
118. Afanas'ev V.P., Bodisko Yu.N., Kaplya P.S., Lobanova L.G., Ridzel O.Yu., Strukov A.N. Analysis of hydrogen isotopes in construction materials by means of electron spectroscopy // J. Phys.: Conf. Ser., 2020, V. 1713. P. 012001. <https://doi.org/10.1088/1742-6596/1713/1/012001>
119. Афанасьев, В. П. Сечения упругого и неупругого рассеяния электронов и легких ионов килоэлектронвольтных энергий в твердых телах : учеб. пособие для студ. спец. «Ядерная энергетика и теплофизика» / В. П. Афанасьев, С. Д. Федорович ; Изд. МЭИ. – Москва : МЭИ, 2017. – 60 с.
120. McCracken G.M., Freeman N.J. Back-scattering of keV hydrogen ions in solids // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., 1969, V. 2, No. 6, P. 661 – 668. <https://doi.org/10.1088/0022-3700/2/6/305>
121. 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>
122. Курнаев В.А., Тельковский В.Г. Экспериментальные данные по обратному рассеянию заряженных частиц // Тексты лекций. – М.: Изд. МИФИ, 1982. – 44 с.
123. Курнаев, Валерий Александрович. Отражение легких ионов от поверхности материалов применительно к проблеме УТС : автореферат дис. ...

доктора физико-математических наук : 01.04.08 / Моск. инж.-физ. ин-т.- Москва, 1992.- 26 с.: ил. РГБ ОД, 9 92-3/1940-6.

124. Булгадарян, Д. Г. Рассеяние протонов кэвных энергий как инструмент анализа тонких слоев на поверхности материалов ТЯР : специальность 01.04.08. – Физика плазмы : диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук / Булгадарян Даниэль Грантович; науч. рук. В. А. Курнаев ; Национальный исследовательский ядерный институт «МИФИ». – Москва, 2020. – 116 с.

125. Andersen H. H. Hydrogen stopping powers and ranges in all elements : V. 3 / H. H. Andersen, J. F. Ziegler. – New York : Pergamon Press, 1977. – 317 p.

126. Goebel D., Roth D., Bauer P. Role of *d* electrons in electronic stopping of slow light ions // Phys. Rev. A: At. Mol. Opt. Phys., 2013, V. 87, No. 6, P. 062903. <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.87.062903>

127. Cantero E.D., Lantschner G.H., Eckardt J.C., Arista N.R. Velocity dependence of the energy loss of very slow proton and deuteron beams in Cu and Ag // Phys. Rev. A: At. Mol. Opt. Phys., 2009, V. 80, No. 3, P. 032904. <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.80.032904>

128. Булгадарян Д.Г., Синельников Д.Н., Ефимов Н.Е., Курнаев В.А. Применение спектроскопии рассеяния протонов кэвных энергий для анализа осаждения лития на вольфрам // Известия Российской академии наук. Серия физическая, 2020, Т. 84, № 6, С. 903 – 907. <https://doi.org/10.31857/S036767652006006X>

129. Afanas'ev V.P., Lobanova L.G., Shulga V.I. Reflection of Light Ions from a Solid Surface: Analytical Model and Computer Simulation // J. Surf. Investig., 2023, V. 17, P. 78 – 83. <https://doi.org/10.1134/S1027451023010032>

130. Koborov N.N., Kurnaev V.A., Telkovsky V.G., Zhabrev G.I. Measurements of energy reflection from metals bombarded with keV d and He ions at various angles of incidence // Radiat Eff. Defects Solids, 1983, V. 69, No. 1-2, P. 135 – 142. <https://doi.org/10.1080/00337578308221731>

131. Shirley D.A. High-resolution x-ray photoemission spectrum of the valence bands of gold // *Physical Review B.*, 1972, V. 5, No. 12, P. 4709 – 4714. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.5.4709>
132. Tougaard S. Quantitative analysis of the inelastic background in surface electron spectroscopy // *Surf. Interface Anal.*, 1988, V. 11, No. 9, P. 453 – 472. <https://doi.org/10.1002/sia.740110902>
133. Went M.R., Vos M. High-resolution study of quasi-elastic electron scattering from a two-layer system // *Surf. Sci.*, 2006, V. 600, No. 10. P. 2070 – 2078. <https://doi.org/10.1016/j.susc.2006.02.038>
134. Vos M., Chatzidimitriou-Dreismann C.A., Abdul-Redah T., Mayers J. Electron and neutron scattering from polymer films at high momentum transfer // *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res., Sect. B*, 2005, V. 227, No. 3, P. 233 – 250. <https://doi.org/10.1016/j.nimb.2004.09.003>
135. Tougaard S. Energy loss in XPS: Fundamental processes and applications for quantification, non-destructive depth profiling and 3D imaging // *J. Electron. Spectrosc. Relat. Phenom.*, 2010, V. 178-179. P. 128 – 153. <https://doi.org/10.1016/j.elspec.2009.08.005>
136. Аккерман А.Ф. Моделирование траекторий заряженных частиц в веществе. — Москва: Энергоатомиздат, 1991. – 200 с.
137. Afanas'ev V., Lubenchenko A., Gubkin M. Quantitative interpretation of EELS and REELS spectra // *The European Physical Journal B - Condensed Matter*, 2004, V. 37, No. 1, P. 117 – 125. <https://doi.org/10.1140/epjb/e2004-00036-x>
138. Пайнс Д. Элементарные возбуждения в твердых телах. — Москва: МИР, 1965. – 383 с.
139. Пайнс Д., Нозьер Ф. Теория квантовых жидкостей. — Москва: МИР, 1967. – 384 с.
140. Афанасьев В.П., Ефременко Д.С., Лубенченко А.В., Вос М., Вент М.Р. Восстановление сечений неупругого рассеяния из энергетических спектров

отраженных атомных частиц // Известия РАН. Серия Физическая, 2010, Т. 74, № 2, С. 189 – 193

141. Смирнов Б.М. Атомные столкновения и элементарные процессы в плазме. — Москва: Атомиздат, 1968. – 364 с.

142. Tilinin I.S. Elastic scattering of electrons and positrons by complex atoms at medium energies // Sov. Phys. JETP, 1988, V. 67, No. 8, P. 1570

143. Tilinin I.S., Werner W.S.M. Angular and energy distribution of Auger and photoelectrons escaping from non-crystalline solid surfaces // Surf. Sci., 1993, V. 290, No. 1-2, P. 119 – 133. [https://doi.org/10.1016/0039-6028\(93\)90594-A](https://doi.org/10.1016/0039-6028(93)90594-A)

144. 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>

145. 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)

146. Будаев В.П., Федорович С.Д., Лукашевский М.В., Мартыненко Ю.В., Губкин М.К., Карпов А.В., Лазукин А.В., Шестаков Е.А., Плазменная установка НИУ «МЭИ» для испытаний тугоплавких металлов и создания высокопористых материалов нового поколения // ВАНТ – Сер. Термоядерный синтез, 2017, Т. 40, № 3, С. 23 – 36. <https://doi.org/10.21517/0202-3822-2017-40-3-23-36>

147. Тихонов А.Н., Арсенин В.Я. Методы решения некорректных задач. — Москва: Наука, 1986. – 288 с.

148. Afanas'ev V.P., Gryazev A.S., Efremenko D.S., Kaplya P.S. Differential inverse inelastic mean free path and differential surface excitation probability retrieval from electron energy loss spectra // Vacuum, 2017, V. 136, P. 146 – 155. <https://doi.org/10.1016/j.vacuum.2016.10.021>

149. Geim A.K., Grigorieva I.V. Van der Waals heterostructures // Nature, 2013, V. 499, P. 419 – 425. <https://doi.org/10.1038/nature12385>

150. Novoselov K.S., Castro Neto A.H. Two-dimensional crystals-based heterostructures: materials with tailored properties // Phys. Scr., 2012, V. 2012, No. T146, P. 014006. <https://doi.org/10.1088/0031-8949/2012/T146/014006>
151. Barrett N., Krasovskii E.E., Themlin J.M., Strocov V.N. Elastic scattering effects in the electron mean free path in a graphite overlayer studied by PES and LEED // Surf. Sci., 2004, V. 566-568, P. 532 – 537. <https://doi.org/10.1016/j.susc.2004.05.104>
152. Werner W.S.M., Bellissimo A., Leber R., Ashraf A., Segui S. Reflection electron energy loss spectrum of single layer graphene measured on a graphite substrate // Surf. Sci., 2015, V. 635, P. L1 – L3. <https://doi.org/10.1016/j.susc.2014.12.016>
153. Werner W.S.M., Astašauskas V., Ziegler P., Bellissimo A., Stefani G., Linhart L., Libisch F. Secondary Electron Emission by Plasmon-Induced Symmetry Breaking in Highly Oriented Pyrolytic Graphite // Phys. Rev. Lett., 2020, V. 125, No. 19, P. 196603. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.125.196603>
154. Taft E.A., Philip H.R. Optical Properties of Graphite // Phys. Rev., 1965, V. 138, P. A197. <https://doi.org/10.1103/PhysRev.138.A197>
155. Wallace P.R. The Band Theory of Graphite // Phys. Rev., 1947, V. 71, No. 9, P. 622. <https://doi.org/10.1103/PhysRev.71.622>
156. Marinopoulos A.G., Reining L., Olevano V., Rubio A., Pichler T., Liu X., Knupfer M., Fink J. Anisotropy and Interplane Interactions in the Dielectric Response of Graphite // Phys. Rev. Lett., 2002, V. 89, No 7, P. 076402. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.89.076402>
157. Eberlein T., Bangert U., Nair R.R., Jones R., Gass M., Bleloch A.L., Novoselov K.S., Geim A., Briddon P.R. 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>
158. Papageorgiou N., Portail M., Layet J.M. Dispersion of the interband π electronic excitation of highly oriented pyrolytic graphite measured by high resolution

electron energy loss spectroscopy // Surf. Sci., 2000, V. 454-456, P. 462 – 466.

[https://doi.org/10.1016/S0039-6028\(00\)00127-8](https://doi.org/10.1016/S0039-6028(00)00127-8)

159. Afanas'ev V.P., Bocharov G.S., Gryazev A.S., Eletsii A.V., Kaplya P.S., Ridzel O.Y. Reduced graphene oxide studied by X-ray photoelectron spectroscopy: evolution of plasmon mode // J. Phys.: Conf. Ser., 2018, V. 1121, P. 012001.

<https://doi.org/10.1088/1742-6596/1121/1/012001>

160. Afanas'ev V.P., Bocharov G.S., Eletsii A.V., Ridzel O.Yu., Kaplya P.S., Köppen M. Evolution of photoelectron spectra at thermal reduction of graphene oxide // J. Vac. Sci. Technol. B, 2017, V. 35, No. 4, P. 041804.

<https://doi.org/10.1116/1.4994788>

161. Afanas'ev V.P., Bocharov G.S., Gryazev A.S., Eletsii A.V., Kaplya P.S., Ridzel O.Yu. Evolution of Plasma-Excitation Mechanisms in the Process of the Thermal Reduction of Graphene Oxide // J. Surf. Investig., 2020, V. 14, No. 2, P. 366 – 370.

<https://doi.org/10.1134/S102745102002041X>

162. Jacob W. // Thin Solid Films, 1998, V. 326, P. 1 – 42

163. Roth J., Garcia-Rosales C. Analytic description of the chemical erosion of graphite by hydrogen ions // Nucl. Fusion, 1996, V. 36, No. 12, P. 1647.

<https://doi.org/10.1088/0029-5515/36/12/I05>

164. Luo G.-N., Zhang X.D., Yao D.M., Gong X.Z., Chen J.L., Yang Z.S., Li Q., Shi B., Li J.G. Overview of plasma-facing materials and components for EAST // Phys. Scr., 2007, V. 2007, No. T128, P. 1 – 5.

<https://doi.org/10.1088/0031-8949/2007/T128/001>

165. Merel P., Tabbal M., Chaker M., Moisa S., Margot J. Direct evaluation of the sp^3 content in diamond-like-carbon films by XPS // Appl. Surf. Sci., 1998, V. 136, No. 1-2, P. 105 – 110.

[https://doi.org/10.1016/S0169-4332\(98\)00319-5](https://doi.org/10.1016/S0169-4332(98)00319-5)

166. Briggs D., Fairley N. XPS of chemically modified low-density polyethylene surfaces: observations on curve-fitting the C 1s spectrum // Surf. Interface Anal., 2002, V. 33, No. 3, P. 283 – 290.

<https://doi.org/10.1002/sia.1212>

167. Pauly N., Novák M., Tougaard S. Surface excitation parameter for allotropic forms of carbon // Surf. Interface Anal., 2012, V. 45, No. 4, P. 811 – 816. <https://doi.org/10.1002/sia.5167>

168. Afanas'ev V.P., Gryazev A.S., Efremenko D.S., Kaplya P.S., Ridzel O.Y. Determination of atomic hydrogen in hydrocarbons by means of the reflected electron energy loss spectroscopy and the X-ray photoelectron spectroscopy // J. Phys.: Conf. Ser., 2016, V. 748, P. 012005. <https://doi.org/10.1088/1742-6596/748/1/012005>

169. Грязев, А. С. Исследование характеристик рассеяния электронов в твёрдых телах для определения толщин нанопокрывтий методами электронной спектроскопии : специальность 05.27.01. – Твердотельная электроника, радиоэлектронные компоненты, микро- и нанoeлектроника, приборы на квантовых эффектах : диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук / Грязев Александр Сергеевич; науч. рук. В. П. Афанасьев ; Национальный исследовательский институт «МЭИ». – Москва, 2017. – 91 с.

170. Попов А.И., Баринов А.Д., Емец В.М., Зезин Д.А., Чуканова Т.С., Афанасьев В.П., Семенов-Шефов М.А., Терехов В.А., Домашевская Э.П., Пресняков М.Ю., Шапетина М.А. Влияние алюминия на структуру и электрические свойства аморфных алмазоподобных кремний-углеродных пленок // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования, 2023, № 11, С. 24 – 32. <https://doi.org/10.31857/S1028096023110171>

171. Robertson J. Diamond-like amorphous carbon // Materials Science and Engineering R, 2002, V. 37, No. 4-6, P. 129 – 281. [https://doi.org/10.1016/S0927-796X\(02\)00005-0](https://doi.org/10.1016/S0927-796X(02)00005-0)

172. Попов А.И., Баринов А.Д., Емец В.М., Кастро Арта Р.А., Колобов А.В., Кононов А.А., Овчаров А.В., Чуканова Т.С. Влияние переходных металлов на диэлектрические свойства алмазоподобных кремний-углеродных пленок // ФТТ, 2021, Т. 63, № 11, С. 1844 – 1851. <https://doi.org/10.21883/FTT.2021.11.51586.132>

173. Сковорода А.А., Спицын А.В., Петров В.С., Полунина А.А. Влияние плазмы токамака Т-10 на вакуумные свойства графита МПГ-8 // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Термоядерный синтез, 2008, № 3, С. 61 – 67

174. Спицын, А.В. Проникновение водорода из плазмы через поликристаллические материалы и графит : специальность 01.04.08. – Физика плазмы : диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук / Спицын Александр Викторович; науч. рук. А. А. Сковорода ; Государственное учреждение Российский Научный Центр «Курчатовский институт». – Москва, 2007. – 153 с.

175. Vergara L.I., Meyer F.W., Krause H.F. Chemical sputtering of ATJ graphite induced by low-energy D_2^+ bombardment // J. Nucl. Mater., 2005, V. 347, No. 1-2, P. 118 – 124. <https://doi.org/10.1016/j.jnucmat.2005.08.001>

176. Zhang H., Meyer F.W., Meyer H.M. III, Lance M.J. Surface modification and chemical sputtering of graphite induced by low-energy atomic and molecular deuterium ions // Vacuum, 2008, V. 82, No. 11, P. 1285 – 1290. <https://doi.org/10.1016/j.vacuum.2008.03.003>

177. Romanov P.V., Kolbasov B.N., Alimov V.Kh., Gureev V.M., Domantovskij A.G., Khimchenko L.N., Orlov P.N. Microstructure and deuterium content of tokamak T-10 carbon erosion products // J. Nucl. Mater., 2002, V. 307-311, P. 1294 – 1299. [https://doi.org/10.1016/S0022-3115\(02\)01064-4](https://doi.org/10.1016/S0022-3115(02)01064-4)