

В. П. Пронин, И. И. Хинич, И. А. Чистотин

**МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ
В ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКО-ОРИЕНТИРОВАННОМ ОБУЧЕНИИ
СТУДЕНТОВ ФИЗИКЕ ПОВЕРХНОСТИ
КОНДЕНСИРОВАННЫХ ВЕЩЕСТВ**

Развивается методический подход к исследовательско-ориентированному обучению студентов основам математического моделирования реальных процессов. Возможности подхода раскрываются на примере теоретиче-

ского анализа явления упругого отражения электронов от поверхности твердого тела.

Ключевые слова: обучение физике поверхности твердого тела, математическое моделирование, электронная спектроскопия, упругое рассеяние электронов.

V. Pronin, I. Khinich, I. Chistotin

MATHEMATICAL MODELING IN RESEARCH-ORIENTED TEACHING STUDENTS THE CONDENSED SUBSTANCES SURFACE PHYSICS

Methodological approach to students research-oriented teaching of basics of mathematical modeling of real processes is developed. The application of the method is described through an example of theoretical analysis of elastic electron scattering from solid surface phenomenon.

Keywords: teaching solid state surface physics, mathematical modeling, electron spectroscopy, elastic electron scattering.

Неотъемлемой составляющей полноценного физического образования является участие студентов в научно-исследовательской работе, их «обучение через науку». При этом несомненный интерес представляет освоение студентами как современных методов физического эксперимента, так и современного теоретического описания наблюдаемых явлений. В работе [10, с. 139–148] на примере обучения студентов физике поверхности конденсированного вещества рассматриваются методические подходы к проведению экспериментальных структурных исследований поверхности твердых тел методами вторично-электронной спектроскопии и предлагаются конкретные учебно-исследовательские задания. В то же время предметом исследовательского обучения студентов может быть и теоретическое описание некоторых вторично-электронных явлений, их математическое моделирование.

Сформулируем основные требования к выбору предметного материала для студенческого теоретического исследования:

- возможность построения относительно простой модели изучаемого явления, допускающей математическое описание;
- возможность модификации модели с целью учета различных реальных факторов;
- разработанность теоретического вопроса на разных уровнях сложности и в рамках разных подходов, что позволяет сопоставлять результаты расчетов, осуществляемых по различным моделям;
- возможность организации современного вычислительного эксперимента;
- востребованность при изучении этого вопроса большого объема знаний по различным разделам физики;
- наличие достаточного количества экспериментальных результатов, что позволяет проведение разностороннего сопоставления расчетов с экспериментом;
- возможность практического использования результатов расчета.

Указанным требованиям полностью удовлетворяет теоретический анализ явления упругого отражения электронов от разупорядоченных поверхностей

твердого тела. Можно отметить множественность подходов к решению этого вопроса (уравнение переноса Больцмана, метод статистических испытаний, феноменологические теории), возможность использования на разных уровнях сложности различных моделей упругого и неупругого рассеяния электронов (в том числе и готовых результатов), возможность сопоставления расчетов с экспериментальными результатами, полученными в настоящее время для широкого класса веществ и энергий. Надо сказать, что при исследовании характеристик упруго отраженных электронов (УОЭ) основными расчетными результатами являются их пространственные распределения, экспериментальное исследование которых является достаточно сложной задачей.

Обсуждаемое теоретическое исследование дидактически и методически значимо, так как его результаты существенны для расширения физических представлений о взаимодействии электронов с твердым телом и позволяют осмыслить возможности использования методов электронной спектроскопии для изучения физики поверхности твердого тела.

В основе моделирования упругого отражения электронов от поверхности твердого тела лежат экспериментальные данные о том, что в области энергий $E > 100$ эВ превалирующую роль в рассматриваемом явлении играют индивидуальные акты упругого взаимодействия электронов с отдельными атомами твердого тела [1, с. 151–165]. В области меньших энергий длина волны де-Бройля становится соизмеримой с межатомным расстоянием, и взаимодействие электрона происходит со многими атомами твердого тела одновременно.

Простейшей феноменологической моделью явления упругого отражения является модель однократного рассеяния, на основе которой студенты могут ознакомиться с принципами рассматриваемого теоретического описания. По этой модели монокинетический пучок электронов с энергией E входит в однородное и изотропное твердое тело под определенным углом φ , экспоненциально ослабляется по мере своего движения и выходит из твердого тела в результате только одного акта рассеяния, происходящего на разных глубинах z (рис. 1).

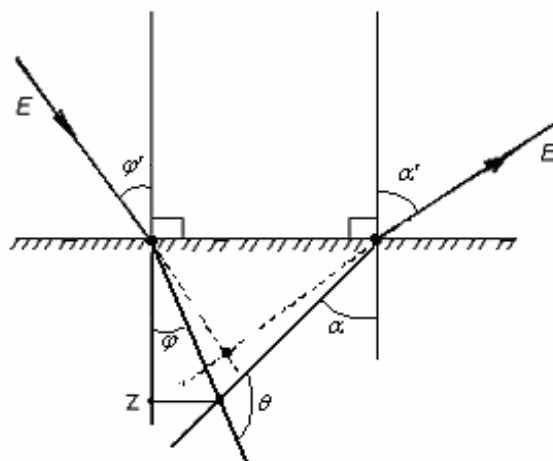


Рис. 1. Траектория электрона в модели однократного рассеяния

Закон экспоненциального ослабления электронного пучка имеет вид: $I = I_0 \cdot \exp(-\mu \cdot d) = I_0 \cdot \exp(-d/\lambda)$, где I — интенсивность пучка после

прохождения пути d ; I_0 — интенсивность падающего пучка; μ — коэффициент ослабления электронного пучка, который считается не зависящим от направления движения и глубины проникновения в вещество; $\lambda = 1/\mu$ — длина свободного пробега электрона в веществе. Ослабление прямолинейного монокинетического электронного пучка определяется двумя процессами: выбыванием электронов за счет актов неупругого взаимодействия (с потерями энергии) и за счет упругого рассеяния; при этом $\mu = \mu_n + \mu_y$ или $\lambda = \lambda_n \cdot \lambda_y / (\lambda_n + \lambda_y)$, где λ_n и λ_y — длины свободных пробегов до неупругого и упругого соударений. Тогда интенсивность потока электронов, упруго рассеянных на угол θ на глубине $z \dots z+dz$ и пересекающих поверхность под углом α внутри телесного угла $\Delta\Omega$:

$$I(\theta, \varphi, z) = I_0 \cdot e^{-\frac{z}{\lambda \cos \varphi}} \cdot \frac{n \cdot dz}{\cos \varphi} \cdot \frac{d\sigma(\theta)}{d\Omega} \cdot e^{-\frac{z}{\lambda \cos \alpha}} \cdot \Delta\Omega,$$

где $\theta = \pi - (\varphi + \alpha)$; второй множитель определяет ослабление «входящего» пучка электронов до упругого рассеяния на глубине z ; третий — вероятность рассеяния на отрезке пути внутри слоя dz ; n — объемная плотность рассеивающих центров, четвертый множитель — это дифференциальное сечение упругого рассеяния, определяющее интенсивность рассеяния на угол θ , пятый — определяет ослабление рассеянного пучка электронов.

Интегрирование последнего выражения по z дает дифференциальный коэффициент упругого отражения электронов (в единичном телесном угле):

$$r_0(\theta, \varphi) = \frac{\int_0^{\infty} I(\theta, \varphi, z) \cdot dz}{I_0 \cdot \Delta\Omega} = \frac{n \cdot \lambda}{1 + \frac{\cos \varphi}{\cos \alpha}} \cdot \frac{d\sigma(\theta)}{d\Omega}. \quad (1)$$

Важнейшей характеристикой упругого рассеяния электронов являются дифференциальные сечения, определение которых представляет достаточно сложную задачу. Как уже указывалось, в области энергий, больших сотен электрон-вольт, с достаточным основанием в качестве рассеивающих центров можно рассматривать отдельные атомы твердого тела. В качестве следующего приближения сечения упругого рассеяния электронов отдельными атомами твердого тела можно использовать соответствующие сечения рассеяния на свободных атомах, которые в настоящее время рассчитаны практически для всех веществ в широком интервале энергий электронов. Результат такой замены целесообразно обсудить со студентами — перекрытие потенциалов соседних атомов в первую очередь проявится при больших прицельных расстояниях и соответственно при малых углах рассеяния.

В простейших случаях дифференциальные сечения упругого рассеяния электронов могут быть определены самими студентами. К этим случаям относятся вычисления по формуле Резерфорда, соответствующей кулоновскому потенциалу, и на основе модификации этой формулы [6] при учете экранирования потенциала ядра внешней электронной оболочкой:

$$\frac{d\sigma(\theta)}{d\Omega} = \frac{4z^2 e^4 m^2}{(8mE \cdot \sin^2(\theta/2) + \hbar^2 / r_{\text{экp}})^2},$$

где $r_{\text{экp}}$ — радиус экранирования.

Область применимости последней формулы (первое приближение Борна) соответствует $E > E_{\text{зp}} = 13,5 \cdot z^2$ (эВ), и в области энергий сотни электрон-вольт — единицы килоэлектрон-вольт она может быть применена только для относительно легких веществ. Для любых веществ в той же области энергий достоверные результаты расчета дифференциальных сечений упругого рассеяния получаются при решении волнового уравнения (в общем случае уравнения Дирака) для корректных потенциалов атома. Как указывалось, в настоящее время такие результаты рассчитаны практически для всех веществ [14], обычно они приводятся в виде таблицы с шагом $\Delta\theta = 1^\circ$. Естественно, что в области применимости первого приближения Борна студенты могут сопоставить собственные расчеты с этой базой данных.

Ясно, что знание дифференциальных сечений упругого рассеяния электронов позволяет вычислить λ_y :

$$\lambda_y^{-1} = n \cdot 2\pi \cdot \int_0^\pi \frac{d\sigma(\theta)}{d\Omega} \cdot \sin\theta \cdot d\theta. \quad (2)$$

Для определения параметра λ_n также существует несколько моделей, вычисления по которым представляют не менее сложную задачу. В то же время для учебно-исследовательской деятельности студентов более предпочтительными являются две другие возможности — воспользоваться готовыми данными для λ_n [15] или оставить этот параметр в качестве подгоночного.

Как уже обсуждалось, одним из важнейших моментов научного творчества студентов является возможность модифицирования феноменологической модели, при этом часть модификаций может быть предложена студентам в готовом виде, а некоторые — на идейном уровне. Так, в работе [3, с. 1755–1759] показано, что, помимо ослабления электронного пучка в объеме твердого тела, определяемого коэффициентом μ , могут быть учтены и поверхностные потери энергии (в первую очередь, на возбуждение поверхностных плазмонов) при прохождении электроном в обе стороны границы твердое тело — вакуум, вероятность которых описывается эмпирической формулой $P(\varphi) = B(z) / (\sqrt{E} \cdot \cos\varphi)$, где $B(z)$ — параметр, определяемый материалом мишени; E , эВ — энергия. Так, для Au экспериментально определенный параметр $B = 2,9$. Тогда:

$$r_0(\theta, \varphi) = (1 - P(\alpha)) \cdot (1 - P(\varphi)) \cdot \frac{n \cdot \lambda}{1 + \frac{\cos\varphi}{\cos\alpha}} \cdot \frac{d\sigma(\theta)}{d\Omega}.$$

В качестве других модификаций модели можно учесть преломление электронов на границе вакуум—твердое тело (рис. 1) по формулам: $\frac{\sin\varphi'}{\sin\varphi} = \frac{\sin\alpha'}{\sin\alpha} = \sqrt{\frac{E + eU_0}{E}}$ (U_0 — внутренний потенциал образца), а также пред-

ложить студентам самостоятельно выполнить корректировку дифференциальных сечений упругого рассеяния на свободных атомах в виде их «обрезания» в области малоуглового рассеяния.

Наконец, интересным для обсуждения со студентами является возможность косвенного учета в рассматриваемой модели нескольких актов рассеяния, чему соответствует изменение в формуле (2) нижнего предела интегрирования 0 на θ_0 . Интегрирование не по всему интервалу изменения θ соответствует тому, что «разрешается» выход в качестве упруго отраженных электронов, испытавшим второе (третье и т. д.) упругое рассеяние в диапазоне углов $[0, \theta_0]$. При небольших θ_0 это дополнительное рассеяние является малоугловым. Математически обсуждаемый косвенный учет кратного рассеяния приводит к росту λ и по формуле (1) — к пропорциональному росту абсолютной интенсивности упругого рассеяния $r_\theta(\theta, \varphi)$ в узком телесном угле при всех θ .

Сопоставление теоретически рассчитанных $r_\theta(\theta, \varphi)$ с экспериментальными кривыми углового распределения УОЭ позволяет обсудить со студентами корректность рассматриваемой модели и влияние на результаты расчета выбора тех или иных параметров. Экспериментальные кривые в разных работах представляются в абсолютных или в относительных единицах. Если они представлены в относительных единицах $I(\theta)$, то возможно сравнение с ними лишь по форме, а сопоставляемые кривые должны быть нормированы при одном и том же угле рассеяния.

На рис. 2 проводится сопоставление экспериментальных угловых распределений УОЭ от Au [3, с. 1755–1759; 4, с. 614–617] в абсолютных (а) и в относительных (б) единицах с теоретическими расчетами по модели однократного упругого рассеяния. Видно, что все теоретические значения являются заниженными и характеризуются несравнимо большим контрастом (отношением интенсивностей в максимуме и в минимуме), соответствующим контрасту дифференциального сечения упругого рассеяния. При этом доля однократно рассеянных электронов существенно различается в минимумах и максимумах углового распределения, составляя в минимумах около 5%, а в максимумах — до 60–70%. Доля однократно рассеянных электронов в интегральном r составляет около 60%.

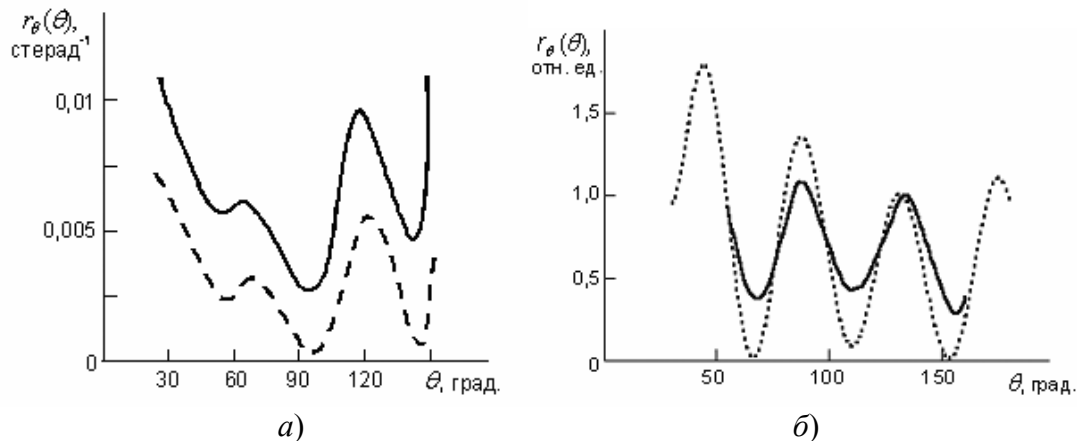


Рис. 2. Угловые распределения $r_\theta(\theta)$ для Au, $\varphi = 75^\circ$: а — $E = 1000$ эВ, б — $E = 500$ эВ (кривые нормированы при $\theta = 130^\circ$).
Сплошные кривые — эксперимент, штриховые — расчет

В общем случае вклад однократно рассеянных электронов уменьшается с ростом отношения λ_n / λ_y . Анализ этого отношения [8, с. 79–85] показывает, что для веществ с большими z оно возрастает с ростом энергии, и для этих веществ модель однократного рассеяния лучше работает в области так называемых средних энергий 100–1000 эВ. Для легких веществ это отношение меньше, чем для тяжелых, и практически не зависит от энергии, что определяет для этих веществ достаточно большой вклад однократного рассеяния.

Таким образом, выясняется, что модель однократного рассеяния не может количественно описать пространственные распределения УОЭ, для корректного описания которых необходим учет кратного рассеяния. В то же время оказывается, что рассмотренная модификация этой модели за счет подбора θ_0 (и соответственно λ_y) при нормальном угле падения первичного пучка позволяет достигнуть достаточно хорошего согласия теоретических результатов с экспериментом как для значений интегрального r (рис. 3), так и для значений $r_\theta(\theta, \varphi)$ для больших углов рассеяния. Для различных веществ в широком диапазоне энергий это «согласие» составляет порядка 10% и практически не ухудшается даже без учета поверхностных потерь.

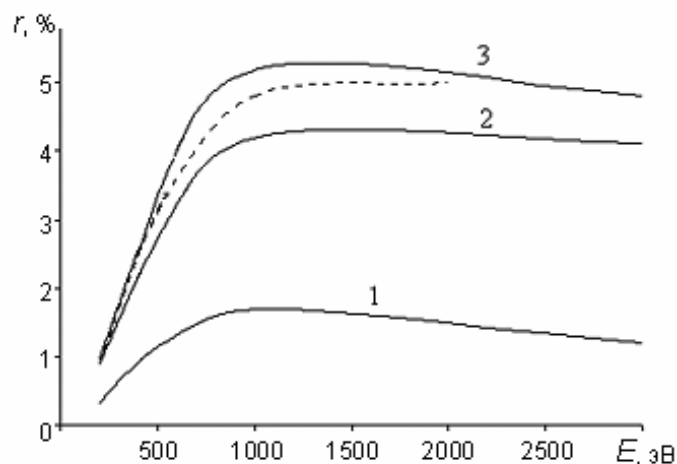


Рис. 3. Зависимости $r(E)$ для Au ($\varphi = 0^\circ$), рассчитанные по модели однократного рассеяния при различных λ_y : 1 — λ_y минимально ($\theta_0 = 0$); 2 — $\theta_0 = \pi/2$; 3 — $\lambda_y = \infty$ ($\lambda = \lambda_n$). Пунктир — эксперимент [17]

Возможность применения модифицированной модели однократного рассеяния для расчета характеристик упругого отражения позволяет студентам провести практически значимое исследование по определению концентрации компонентов образца, состоящего из двух и более известных элементов [7, с. 21–26].

Рассмотрим случай двухкомпонентного образца. Пусть для такого образца при определенном значении энергии E и при $\varphi = 0^\circ$ известны значения интенсивностей потоков УОЭ в узком телесном угле $I(\theta)$ в относительных единицах для двух углов рассеяния θ_1 и θ_2 (в диапазоне больших θ , где лучше «работает» модифицированная модель однократного рассеяния). Отношение этих интенсивностей $I(\theta_2)/I(\theta_1)$ не зависит от λ и может быть представлено в виде

$$\frac{I(\theta_1)}{I(\theta_2)} = \frac{\left(1 + \frac{1}{\cos(\pi - \theta_2)}\right) \cdot \left(n_1 \frac{d\sigma_1(\theta_1)}{d\Omega} + n_2 \frac{d\sigma_2(\theta_1)}{d\Omega}\right)}{\left(1 + \frac{1}{\cos(\pi - \theta_1)}\right) \cdot \left(n_1 \frac{d\sigma_1(\theta_2)}{d\Omega} + n_2 \frac{d\sigma_2(\theta_2)}{d\Omega}\right)}, \quad (3)$$

где n_1 и n_2 — неизвестные концентрации известных рассеивающих центров; $d\sigma_1(\theta)/d\Omega$, $d\sigma_2(\theta)/d\Omega$ — дифференциальные сечения упругого рассеяния для атомов 1-го и 2-го элементов.

Выражение (3) позволяет определить отношение атомных концентраций компонентов твердого тела n_1/n_2 . Для определения их абсолютных значений n_1 и n_2 нужно дополнительно измерить плотность двухкомпонентного образца $\rho = n_1 \cdot m_1 + n_2 \cdot m_2$, где m_1 и m_2 — известные массы атомов. Практически таким методом концентрация элементов (которая может быть легко пересчитана и в весовые проценты) определяется с погрешностью около 20%, однако при уточнении модели упругого отражения удается повысить и точность метода.

Важной особенностью обсуждаемой методики является то обстоятельство, что она позволяет в одном эксперименте определить и длину свободного пробега электронов λ двухкомпонентной системы, которая является общей для многокомпонентного образца и не может быть определена из λ_1 и λ_2 отдельных компонент. Для нахождения λ двухкомпонентной системы необходимо измерить абсолютное значение $r_\theta(\theta)$ для одного угла рассеяния при выбранной энергии:

$$r_\theta(\theta) = \lambda \cdot \left(1 + \frac{1}{\cos(\pi - \theta)}\right)^{-1} \cdot \left(n_1 \frac{d\sigma_1(\theta)}{d\Omega} + n_2 \frac{d\sigma_2(\theta)}{d\Omega}\right). \quad (4)$$

Отметим, что длина свободного пробега электронов относительно упругого взаимодействия для двухкомпонентной системы определяется по формуле

$$\lambda_y^{-1} = n_1 \cdot 2\pi \int_{\theta_0}^{\pi} \frac{d\sigma_1(\theta)}{d\Omega} \cdot \sin\theta \cdot d\theta + n_2 \cdot 2\pi \int_{\theta_0}^{\pi} \frac{d\sigma_2(\theta)}{d\Omega} \cdot \sin\theta \cdot d\theta. \quad (5)$$

Подставив в формулу (4) n_1 и n_2 , с учетом выражения (5) можно рассчитать не только λ , но и λ_n . Конечно, для определения λ двухкомпонентной системы вместо абсолютной интенсивности УОЭ в узком телесном угле можно использовать и значение интегрального коэффициента упругого отражения электронов. Важно отметить, что одновременное определение таким методом λ двухкомпонентной системы позволяет обсудить со студентами возможность не только количественного определения элементного состава, но и определения его распределения по глубине. Для большинства веществ изменение энергии электронов E от 100 до 1000 эВ изменяет толщину анализируемого слоя от долей до единиц нанометров.

Студентам для организации подобного теоретического исследования нужно для конкретного двухкомпонентного вещества задать три значения: отношение интенсивностей УОЭ при двух определенных углах рассеяния при конкретной энергии E и нормальном угле падения падающих электронов, плотность ρ двухкомпонентного образца и интегральное r при той же E .

Значительно лучшего согласия с экспериментом, чем по модели однократного рассеяния, можно достичь в более сложных феноменологических теориях упругого отражения электронов, таких как модель кратного рассеяния или модели на основе решения уравнения переноса Больцмана [12, с. 357–374; 16, с. 1665–1676]. В то же время, с методической точки зрения, после обсуждения результатов расчета по модели однократного рассеяния целесообразно перейти со студентами к методу статистического моделирования электронных траекторий (метод Монте-Карло), который позволяет проводить детальное проследивание электронных траекторий и получать в одном сеансе счета самую разнообразную информацию [13, с. 13–18].

Для моделирования электронных траекторий в твердом теле используются две основные схемы: схема индивидуальных соударений и схема непрерывного замедления. Рассмотрим сначала схему индивидуальных соударений, являющуюся наиболее общей — в ней траектория движения электрона представляется ломаной линией (рис. 4), в углах которой происходит упругое или неупругое взаимодействие электрона с веществом. Учет этих взаимодействий — в принципе такой же, как и в модели однократного упругого рассеяния.

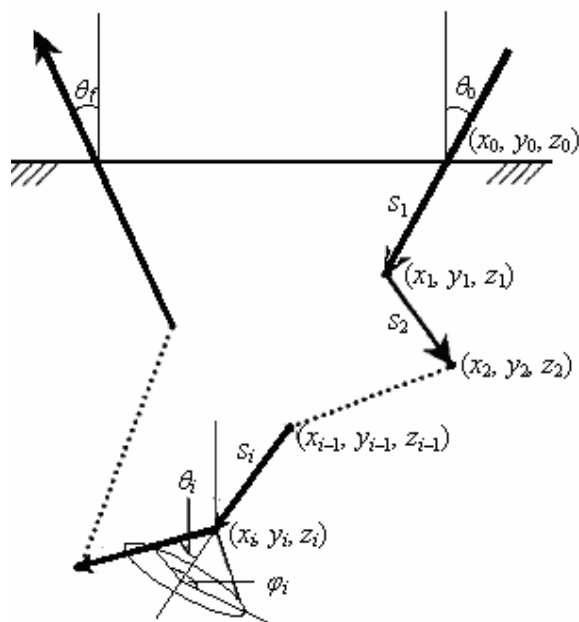


Рис. 4. Траектория электрона по модели индивидуальных соударений

Перед вычислениями в программу вводятся все необходимые табличные данные: дифференциальные сечения упругого рассеяния, значения λ_n и другие. Вычисления начинаются с задания начальных условий расчета: энергии E , угла входа электронов θ_0 , соответствующего углу падения электронов на образец, порядкового номера вещества z , шага расчета $\Delta\theta$ и общего числа N вбрасываемых электронов. На основании исходных данных вычисляются такие параметры образца, как λ и λ_y .

В процессе расчета в цикл вычислений вбрасывается очередной k -й электрон, которому до цикла присваиваются начальные координаты $x_0 = y_0 = z_0 = 0$ и начальный номер шага вычислений $i = 0$. Последовательность шагов вычислительного цикла соответствует следующим действиям.

1. Определяем текущий номер шага вычислений: $i = i + 1$.

2. Выбрасываем случайное число W_1 , равномерно распределенное на промежутке $[0; 1]$ и разыгрываем длину s_i прямолинейного пробега электрона на данном шаге по формуле: $s_i = -\lambda_y \cdot \ln W_1$. Выбор случайного числа в виде его логарифма решает две задачи [9]: преобразование интервала случайных чисел $[0; 1]$ в интервал $[0; \infty]$ и трансформирование их равномерного распределения в логарифмическое. Последнее лучше отвечает реальному распределению длин пробегов, вероятность которых экспоненциально уменьшается с ростом их величины.

3. Вычисляем декартовы координаты точки i -го узла взаимодействия по формулам: $x_i = x_{i-1} + s_i \cdot \cos \alpha_i$, $y_i = y_{i-1} + s_i \cdot \cos \beta_i$, $z_i = z_{i-1} + s_i \cdot \cos \gamma_i$, где x_{i-1} , y_{i-1} , z_{i-1} — координаты точки $i - 1$ -го узла взаимодействия; $\cos \alpha_i$, $\cos \beta_i$, $\cos \gamma_i$ — направляющие косинусы, рассчитываемые по формулам [5].

4. Проверяем по значению z , вышел ли электрон из объема мишени. Если — да, то его траектория заканчивается, в модуле выходных данных запоминаются его угол выхода, кратность упругого рассеяния на атомах мишени (по значению i), после чего на первый шаг цикла вбрасываем очередной $k+1$ -й электрон.

5. Если электрон не вышел из мишени, определяем вид процесса в i -м узле взаимодействия: упругое рассеяние или неупругое. Для этого выбрасываем случайное число W_2 $[0; 1]$ и составляем соотношение λ / λ_y , которое характеризует вероятность упругого рассеяния. Если $\lambda / \lambda_y \geq W_2$, то электрон испытал упругое рассеяние. В случае $\lambda / \lambda_y < W_2$ электрон испытал неупругое рассеяние, его траектория заканчивается, он выбывает из рассмотрения, а на первый шаг цикла вбрасываем очередной $k + 1$ -й электрон.

6. В случае упругого рассеяния электрона разыгрываем полярный θ_i и азимутальный φ_i углы его рассеяния. Для этого розыгрыша выбрасываем два случайных числа W_3 $[0; 1]$ и W_4 $[0; 1]$. Полярный угол рассеяния определяется по дифференциальным сечениям упругого рассеяния:

$$W_3 \cdot \sigma_y = 2\pi \int_0^{\theta_i} \frac{d\sigma(\theta')}{d\Omega} \cdot \sin\theta' \cdot d\theta', \text{ где } \sigma_y = (n \cdot \lambda_y)^{-1} \text{ — полное сечение упругого}$$

рассеяния электронов, а n — объемная плотность рассеивающих центров.

Как видно, θ_i определяется из сопоставления нормированного интеграла от дифференциального сечения упругого рассеяния с равномерным распределением случайного числа. Такой розыгрыш широко применяется в расчетах по методу Монте-Карло и позволяет выбрасывать значение θ_i с плотностью вероятности, пропорциональной дифференциальному сечению рассеяния. Азимутальный угол рассчитывается по формуле $\varphi_i = 2\pi W_4$.

7. Вычисляем направляющие косинусы следующего прямолинейного участка траектории и возвращаемся на первый шаг алгоритма.

После вбрасывания всех электронов программа рассчитывает абсолютные интенсивности электронов, упруго отраженных под углом θ_f в интервале углов

$$\Delta\theta \text{ по формуле } r_\theta(\theta_f, \theta_0) = \frac{1}{N} \cdot \sum_{k=1}^N I_k, \text{ где } N \text{ — количество генерируемых траек-}$$

торий, $I_k = 1$, если k -й электрон вышел из твердого тела в данном интервале углов рассеяния и $I_k = 0$ — в противном случае.

В данном расчете, как и в модели однократного рассеяния, может быть учтено ослабление электронного потока за счет поверхностных потерь:

$$P(\theta_f, \theta_0) = \left(1 - \frac{B}{\sqrt{E} \cdot \cos\theta_f}\right) \cdot \left(1 - \frac{B}{\sqrt{E} \cdot \cos\theta_0}\right).$$

Тогда уточненная формула для абсолютной интенсивности электронов, упруго отраженных под углом θ_f :

$$r_\theta(\theta_f, \theta_0) = P(\theta_f, \theta_0) \cdot \frac{1}{N} \cdot \sum_{k=1}^N I_k.$$

Для сопоставления этих расчетных результатов с экспериментальными данными по угловому распределению УОЭ в выражении $r_\theta(\theta_f, \theta_0)$ необходимо пересчитать угол θ_f в угол рассеяния θ по формуле $\theta = \pi - (\theta_0 + \theta_f)$.

Естественно, что при использовании метода статистического моделирования электронных траекторий важным является вопрос о необходимом количестве N вбрасываемых электронов, которое студенты оценивают на основе статистической погрешности интенсивности УОЭ в узком телесном угле. Такой анализ корректно проводить при углах, которым соответствуют относительно малые значения интенсивности $r_\theta(\theta, \theta_0)$. Как известно, в этом случае простейшая формула относительной погрешности: $\delta(\theta; \theta + \Delta\theta) = 1/\sqrt{\Delta n}$, где Δn — количество электронов, отраженных в угол θ в интервале шага расчета $\Delta\theta$. Шаг расчета определяется угловой шириной немонотонностей углового распределения УОЭ и должен быть порядка единиц градусов. Расчет статистической погрешности при $\Delta\theta = 1^\circ$ показал, что при $N = 10^8$ она составляет 0,8%, при $N = 10^7$ — 3%, а при $N = 10^6$ — 9%. Обычно при расчетах количество налетающих электронов выбирается $N = 10^7 \dots 10^8$.

На рис. 5 представлены рассчитанные кривые углового распределения УОЭ для Au при различных N и проведено сопоставление этих результатов с экспериментом [2, с. 2086–2088]. Увеличение числа вбрасываемых электронов повышает точность расчета, который в данном случае очень хорошо описывает экспериментальные результаты.

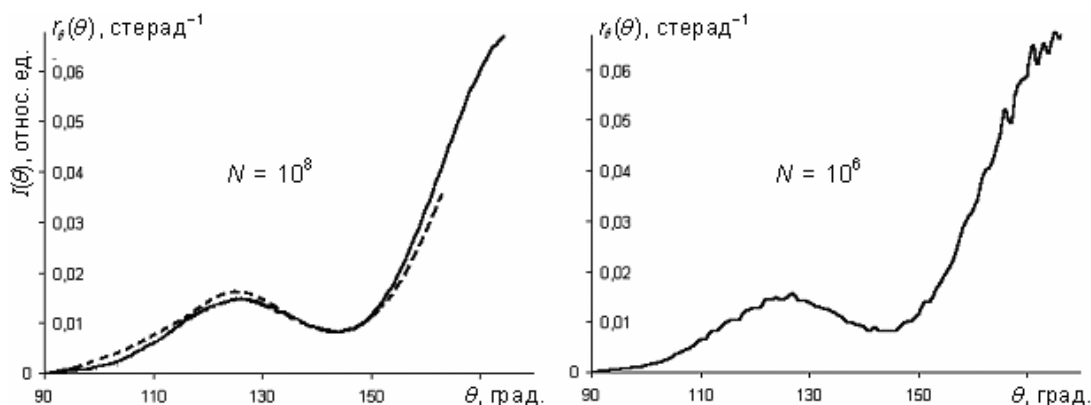


Рис. 5. Угловые распределения УОЭ для Au ($E = 1000$ эВ, $\varphi = 0^\circ$), рассчитанные по схеме индивидуальных соударений при различных N . Пунктир — эксперимент

К недостатку данной схемы (общий недостаток метода Монте-Карло) можно отнести большие затраты машинного времени на получение статистически достоверных результатов. Для ускорения расчетов можно обсудить со студентами различные модификации схемы индивидуальных соударений, одной из которых является схема непрерывного замедления. При использовании этой модификации предполагается, что в узлах траектории электроны испытывают только упругие взаимодействия, а неупругие процессы учитываются различным образом на основе ослабления электронного потока.

В качестве «базовой» модификации схемы непрерывного замедления можно рассмотреть схему, примененную в работе [11] для расчета углового распределения УОЭ в области энергий $E > 2$ кэВ. В этой модели расчета неупругие процессы предлагается учитывать с помощью двух факторов. Первый и основной из них — экспоненциальный закон ослабления электронного потока $I = I_0 \exp(-s/\lambda_n)$, где s — полная длина ломаной траектории электрона, причем это ослабление учитывается при выходе УОЭ из твердого тела. Вторым фактором является ограничение максимальной длины ломаной траектории электрона величиной s_{max} , при этом значение s_{max} может быть оценено, например, по началу стабилизации рассчитанных значений интегрального коэффициента упругого отражения электронов в зависимости от s_{max} . Можно отметить, что применение данной схемы позволяет, как минимум, вдвое сократить затраты машинного времени на построение одной траектории.

Естественно, что схема непрерывного замедления является упрощенной схемой, поэтому результаты расчета по этой схеме нужно сравнивать с результатами, полученными по общей схеме индивидуальных соударений. Оказалось, что результаты, полученные по схеме непрерывного замедления, для всех исследованных веществ в области средних энергий являются заниженными по сравнению с результатами расчета по общей схеме индивидуальных соударений (рис. 6).

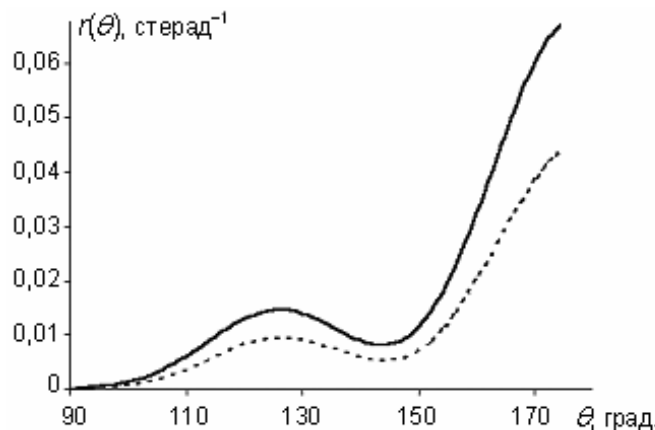


Рис. 6. Угловые распределения УОЭ для Au ($E = 1000$ эВ, $\varphi = 0^\circ$), рассчитанные по моделям индивидуальных соударений (сплошная кривая) и непрерывного замедления (пунктир)

Полученные различия позволяют говорить о неприменимости рассматриваемой модификации схемы непрерывного замедления для расчета характеристик упругого отражения электронов в области средних энергий

100 эВ < E < 3000 эВ. В то же время, с методической точки зрения, полученный результат не является отрицательным, он позволяет обсудить со студентами причины этих различий — ввиду того, что максимальная длина ломаной траектории электрона в расчетах практически не ограничивалась, причиной различий является слишком сильный закон ослабления электронного потока. Возможно, определенное изменение закона ослабления может улучшить согласие расчетов с экспериментом, что продемонстрирует студентам возможности научного творчества при проведении теоретического исследования.

Авторы выражают благодарность С. Д. Ханину за полезные обсуждения результатов работы.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Бронштейн И. М., Пронин В. П., Хинич И. И., Чистотин И. А. Спектроскопия упругого отражения электронов как эффективный метод диагностики поверхности твёрдого тела // Известия РГПУ им. А. И. Герцена: Физика: Научный журнал. 2006. № 6(15).
2. Бронштейн И. М., Пронин В. П. Упругое отражение электронов средних энергий от твердых тел // ФТТ. 1975. Т. 17. В. 7.
3. Бронштейн И. М., Васильев А. А., Пронин В. П., Хинич И. И. Упругое отражение электронов средних энергий от неупорядоченных металлических поверхностей // Известия АН СССР. Сер. физич. 1985. Т. 49. № 9.
4. Бронштейн И. М., Пронин В. П., Хинич И. И. Энергетические спектры неупругоотраженных электронов от золота и бария в узком телесном угле // ФТТ. 1981. Т. 22. В. 2.
5. Ермаков С. М. Метод Монте-Карло и смежные вопросы. М.: Наука, 1971. 328 с.
6. Мотт Н., Мессси Г. Теория атомных столкновений / Пер. с англ. М.: Мир, 1969. 756 с.
7. Пронин В. П., Хинич И. И., Чистотин И. А. Спектроскопия упругого отражения электронов для количественного элементного анализа поверхности твердого тела // Письма в журнал технической физики. 2008. Т. 34. В. 19.
8. Пронин В. П., Хинич И. И., Чистотин И. А. Однократное и кратное рассеяние в упругом отражении электронов поверхностью твердого тела // Физический вестник. Вып. 1: Сб. научн. статей. СПб.: Ин-т профтехобразования РАО, 2007.
9. Соболев И. М. Метод Монте-Карло. М.: Наука, 1968. 64 с.
10. Хинич И. И. Современные методы физического эксперимента в исследовательском обучении студентов физике поверхности конденсированных веществ // Физическое образование в вузах. 2007. Т. 13. № 3.
11. Jablonski A. Elastic backscattering of electrons from surfaces // Surf. Sci. 1985. V. 151.
12. Jablonski A. Analytical applications of elastic electron backscattering from surfaces // Progress in Surface Science. 2003. V. 74.
13. Kwei C. M., Su P., Chen Y. F., Tung C. J. Monte Carlo calculations of the reflection electron energy loss spectra in gold // J. Phys. D: Appl. Phys. 1997. V. 30.
14. Powell C. J., Jablonski A. NIST electron elastic-scattering cross-section database. Version 3.1, Standard Reference Data Program Database 64, National Institute of Standards and Technology. Gaithersburg, MD, 2003.
15. Powell C. J., Jablonski A. NIST electron inelastic-mean-free-path database. Version 1.1, Standard Reference Data Program Database 71, US Department of commerce, National Institute of Standards and Technology. Gaithersburg, MD, 2000.
16. Schilling J. S., Webb M. B. Low-energy electron diffraction from liquid Hg: multiple scattering, scattering factor and attenuation // Phys. Rev. B. 1970. V. 2. № 6.
17. Schmid R., Gaukler K. H., Seiler H. Measurement of elastically reflected electrons ($E \leq 2,5$ keV) for imaging of surfaces in a sample ultrahigh vacuum scanning electron microscope // Scanning Electron Microscopy. 1983. V. 11. P. 501–509.

REFERENCES

1. *Bronshtein I. M., Pronin V. P., Hinich I. I., Chistotin I. A.* Spektroskopiya uprugogo otrajeniya elektronov kak effektivnyi metod diagnostiki poverhnosti tverdogo tela // *Izvestiya RGPU im. A. I. Gercena. Fizika: Nauchnyi jurnal.* 2006. № 6 (15).
2. *Bronshtein I. M., Pronin V. P.* Uprugoe otrajenie elektronov srednih energii ot tverdyh tel // *FTT.* 1975. T. 17. V. 7.
3. *Bronshtein I. M., Vasil'ev A. A., Pronin V. P., Hinich I. I.* Uprugoe otrajenie elektronov srednih energii ot neuporyadochennyh metallicheskih poverhnostei // *Izvestiya AN SSSR. Ser. fizich.* 1985. T. 49. № 9.
4. *Bronshtein I. M., Pronin V. P., Hinich I. I.* Energeticheskie spektry neuprugootrajennyh elektronov ot zolota i bariya v uzkom telesnom ugle // *FTT.* 1981. T. 22. V. 2.
5. *Ermakov S. M.* Metod Monte-Karlo i smeжныe voprosy. M.: Nauka, 1971. 328 s.
6. *Mott N., Messis G.* Teoriya atomnyh stolknovenii / Per. s angl. M.: Mir, 1969. 756 s.
7. *Pronin V. P., Hinich I. I., Chistotin I. A.* Spektroskopiya uprugogo otrajeniya elektronov dlya kolichestvennogo elementnogo analiza poverhnosti tverdogo tela // *Pis'ma v jurnal tehnicheckoi fiziki.* 2008. T. 34. V. 19.
8. *Pronin V. P., Hinich I. I., Chistotin I. A.* Odnokratnoe i kratnoe rasseyanie v uprugom otrajenii elektronov poverhnost'yu tverdogo tela // *Fizicheskii vestnik. Vyp. 1. Sb. nauchn. statei.* SPb.: In-t proftehhobrazovaniya RAO, 2007.
9. *Sobol' I. M.* Metod Monte-Karlo. M.: Nauka, 1968. 64 s.
10. *Hinich I. I.* Sovremennye metody fizicheskogo eksperimenta v issledovatel'skom obuchenii studentov fizike poverhnosti kondensirovannyh veschestv // *Fizicheskoe obrazovanie v vuzah.* 2007. T. 13. № 3.
11. *Jablonski A.* Elastic backscattering of electrons from surfaces // *Surf. Sci.* 1985. V. 151.
12. *Jablonski A.* Analytical applications of elastic electron backscattering from surfaces // *Progress in Surface Science.* 2003. V. 74.
13. *Kwei C. M., Su P., Chen Y. F., Tung C. J.* Monte Carlo calculations of the reflection electron energy loss spectra in gold // *J. Phys. D: Appl. Phys.* 1997. V. 30.
14. *Powell C. J., Jablonski A.* NIST electron elastic-scattering cross-section database. Version 3.1, Standard Reference Data Program Database 64, National Institute of Standards and Technology. Gaithersburg, MD, 2003.
15. *Powell C. J., Jablonski A.* NIST electron inelastic-mean-free-path database. Version 1.1, Standard Reference Data Program Database 71, US Department of commerce, National Institute of Standards and Technology. Gaithersburg, MD, 2000.
16. *Schilling J. S., Webb M. B.* Low-energy electron diffraction from liquid Hg: multiple scattering, scattering factor and attenuation // *Phys. Rev. B.* 1970. V. 2. № 6.
17. *Schmid R., Gaukler K. H., Seiler H.* Measurement of elastically reflected electrons ($E \leq 2,5$ keV) for imaging of surfaces in a sample ultrahigh vacuum scanning electron microscope // *Scanning Electron Microscopy.* 1983. V. 11.