

# Применение фотометрической теории светового поля в задачах рассеяния электронов

В.П. АФАНАСЬЕВ<sup>1</sup>, В.П. БУДАК<sup>1</sup>, Д.С. ЕФРЕМЕНКО<sup>2</sup>, П.С. КАПЛЯ<sup>3</sup>

<sup>1</sup> НИУ «МЭИ», Москва

<sup>2</sup> Германский центр авиации и космонавтики (DLR) и Технический университет Мюнхена (TU München), ФРГ

<sup>3</sup> Компания «Яндекс», Москва

E-mail: budakvp@gmail.ru, dmitry.efremenko@dlr.de, pavel@kaplya.com

## Аннотация

Физическая модель светового поля эквивалентна теории распространения пучков элементарных частиц в приближении классической механики. Все уравнения, описывающие распределение яркости светового поля, идентичны уравнениям для плотности пучка частиц с точностью до используемой терминологии. С конца 19 века обе теории развиваются параллельно друг другу, взаимно обогащаясь: прорыв в одной теории приводит к прогрессу в другой. На сегодня особенно важно, что точность экспериментов в физике частиц близка к предельной, что позволяет проверять многие соотношения теории светового поля в мутной среде, где пока подобная точность недостижима. На основе световых аналогий в статье рассмотрен алгоритм расчёта потока электронов, упруго рассеиваемого плоскопараллельными твердотельными слоями с резко анизотропным законом акта элементарного рассеяния. Проведено сравнение результатов расчётов с экспериментальными данными по угловым распределениям электронов, упруго отражённых от двуслойных твердотельных мишеней.

**Ключевые слова:** теория переноса, малоугловое приближение, теория светового поля, электронная спектроскопия, инвариантное погружение.

## Введение

Описание плотности потока элементарных частиц полностью эквивалентно законам распространения световых пучков в лучевом приближении. Эти законы справедливы для всех классических частиц, когда возможна их однозначная локализация в пространстве. Суть лучевого приближения для света с квантовых позиций [1] сводится к представлению о фотоне как о малой частице, движущейся по траекториям-лучам. Плотность потока фотонов определяется яркостью  $L(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{l}})$  пучка лучей в точке  $\mathbf{r}$  по направлению  $\hat{\mathbf{l}}$ , которая подчиняется уравнению переноса излучения (УПИ):

$$(\hat{\mathbf{l}}, \nabla)L(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{l}}) = -\varepsilon L(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{l}}) + \frac{\sigma}{4\pi} \oint L(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{l}}') x(\hat{\mathbf{l}}, \hat{\mathbf{l}}') d\hat{\mathbf{l}}', \quad (1)$$

где  $\varepsilon$  и  $\sigma$  – показатели ослабления и рассеяния света элементарным объёмом среды,  $x(\hat{\mathbf{l}}, \hat{\mathbf{l}}')$  – индикатриса рассеяния. УПИ впервые сформулировано в работе [2] для среды без рассеяния, что приводит для малых толщ среды к закону Бугера (Bouguer) – экспоненциальному ослаблению яркости вдоль луча.

Уравнение переноса для потока частиц записывается в аналогичном виде:

$$(\hat{\mathbf{l}}, \nabla)\psi(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{l}}) = -(\sigma_{el} + \sigma_{in})\psi(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{l}}) + \frac{\sigma_{el}}{4\pi} \oint \psi(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{l}}') x(\hat{\mathbf{l}}, \hat{\mathbf{l}}') d\hat{\mathbf{l}}', \quad (2)$$

где  $\psi(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{l}})$  – плотность потока частиц в точке  $\mathbf{r}$  по направлению  $\hat{\mathbf{l}}$ ,  $\sigma_{el}$  – сечение упругого рассеяния,  $\sigma_{in}$  – сечение неупругого рассеяния.

Уравнение вида (2) используется для определения плотности потока фотонов или электронов, отражаемых от слоисто-неоднородных сред с подстилающей поверхностью. С ним сталкиваются как при решении проблем дистанционного зондирования атмосферы Земли, так и при расшифровке спектров электронной спектроскопии, описании процесса электронной литографии, определении фактора обратного рассеяния в локальном рентгеноспектральном анализе, рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии (РФЭС), спектроскопии отражённых электронов (СОЭ) и т.д.

Описание как электронного, так и оптического рассеяния ведётся на основе уравнений переноса. При этом методы, созданные для решения оптических задач, активно используются для описания процессов рассеяния атомных частиц в твёрдых телах [3–5].

Методы электронной спектроскопии позволяют легко решать задачи определения качественного состава образцов. Однако количественный анализ сталкивается с проблемой последовательного аналитического описания процессов многократного упругого и неупругого рассеяния электронов в образцах. Задача количественного определения послойного компонентного состава образцов на основе анализа энергетических спектров эмитированных электронов относится к классу некорректных задач математической физики, что ставит дополнительные требования к процедуре расчёта сигнала рассеяния.

Существующие методы рутинного анализа сигналов в РФЭС и спектроскопии пиков упруго-отражённых электронов (СПУЭ) с целью получения информации о мишени базируются на подходах, полностью игнорирующих процессы упругого рассеяния электронов в рамках так называемого *SLA*-приближения (*Straight Line Approximation*) [6, 7]. Однако *SLA* приводит к ошибкам, величина которых может быть непредсказуемо высока [8]. Ошибка *SLA*-подхода возникает из того, что сечение упругого рассеяния  $\sigma_{el}$  в наиболее актуальных для РФЭС-, СПУЭ- и СОЭ-спек-

троскопий ситуациях больше сечения неупругого рассеяния, т.е.  $\sigma_{el} > \sigma_{in}$ .

При этом компенсировать указанные ошибки пытаются, вводя некие поправочные коэффициенты в формулы, полученные на основе *SLA*-подхода. Однако это не всегда даёт нужный эффект, поскольку невозможно учесть множество факторов, приводящих к методическим погрешностям, без установления вызывающих их причин. В отличие от дистанционного зондирования в области электронного рассеяния имеется целый ряд независимых методов определения послойного и компонентного составов рассеивающих мишеней, что даёт возможность экспериментальной верификации методов, используемых для описания процессов отражения от слоисто-неоднородных сред. Контролировать состав и размеры исследуемой методами электронной спектроскопии мишени можно и в процессе её приготовления; при этом расшифровку послойного состава на основе анализа электронных спектров можно выполнять методами, развитыми в теории оптического переноса. Так, наличие экспериментальных данных по угловым распределениям упругоотражённых электронов [9–11] позволяет (см. ниже) использовать в расчётах радиационные коды и модели, используемые в операционных алгоритмах обработки данных спутникового дистанционного зондирования атмосферы Земли [12–15]. Указанные обстоятельства использовались для экспериментальной верификации кода [16].

Метод инвариантного погружения был создан В.А. Амбарцумяном в 40-е годы для описания процессов переноса излучения в атмосферах звёзд и планет [17, 18]. Сущность метода заключается в переходе в УПИ от яркости к формулировке уравнений относительно коэффициентов яркости слоя по отражению и пропусканию. Своё развитие метод получил в работах С. Chandrasekara, В.В. Соболева [19, 20] и др. В этих работах подробно рассмотрены случаи, когда элементарное рассеяние можно характеризовать сферической индикатрисой или индикатрисой Рэлея [17–20]. По этой причине одной из эффективных методик решения была итерационная, где в первом приближении выбиралось решение для однократного рассеяния [18]. Для получения правильного результата было достаточно трёх-четырёх итераций. Однако большой прикладной интерес связан с задачами, в которых индикатриса сильно вытянута вперёд и в элементарном акте преобладает малоугловое рассеяние. Сильная вытянутость индикатрисы упругого рассеяния вперёд характерна для про-

цесса рассеяния электронов в твёрдом теле и фотонов в мутной среде. В настоящей работе будет показано, что случай малоуглового рассеяния позволяет заметно упростить методику решения, поскольку допускает линеаризацию нелинейных уравнений Chandrasekara.

Впервые преимущества сильной вытянутости индикатрисы были использованы С. Гаудсмитом и Д. Саундерсеном [21, 22] для решения уравнения переноса электронов на основе малоуглового приближения и метода сферических гармоник. Рассматривалась бесконечная среда, в центре которой (плоскость с координатой  $z = 0$ ) расположены источники света (или частиц) удовлетворяющие

условию  $L(z = 0, \hat{\mathbf{i}}) = \delta(\hat{\mathbf{i}} - \hat{\mathbf{i}}_0)$ . Развитию методов решения

уравнений переноса в малоугловом приближении посвящены работы У. Скотта [23]. Впервые уравнение Амбарцумяна (решающее граничную задачу об отражении от полубесконечной среды) было использовано для описания процесса электронного рассеяния в работе Р. Дашена [3]. Успешные попытки решения линеаризованных уравнений Амбарцумяна и Chandrasekara в малоугловом приближении были предприняты в работах [4, 24]. В настоящей работе малоугловым приближением мы называем все действия, связанные с наличием малого параметра

$$x(\pi) / x(0) \ll 1. \quad (3)$$

На основе малоуглового приближения в настоящей работе будут получены аналитические выражения, позволяющие описывать процессы отражения излучения как от полубесконечного слоя, так и от слоёв конечной толщины. Будут представлены малоугловые решения уравнений Chandrasekara для функции пропускания. Будет показано, что реализация малоугловых приближений возможна только при использовании системы уравнений для функции пропускания, полученной Chandrasekarом [19], а не подхода, представленного в работе [25]. Будет построена итерационная процедура, решающая задачу об отражении от многослойных мишеней с подстилающей поверхностью.

Основным преимуществом приближённых аналитических решений является их быстродействие, что создаёт комфортные условия для решения обратных задач методом подбора. При этом и дистанционное зондирование, и определение послойного и компонентного составов в электронной спектроскопии – это решение обратных, ма-

Рис. 1. Функции отражения в случае нормального падения излучения на полубесконечный рассеивающий слой. Расчёт для случая индикатрисы Хеньи-Гринштейна. На графиках *а* демонстрируется влияние нелинейного слагаемого на величину функции отражения. Расчёты с учётом (сплошная линия) и без учёта (штриховая линия) нелинейного слагаемого. На графиках *б* указан рост погрешности малоуглового приближения с уменьшением вытянутости индикатрисы. Сплошная линия – численное решение (по программе «*MDOM*»), штриховая линия – малоугловое приближение. Зондирование – по нормали, альbedo однократного рассеяния – 0,67. Стрелками указаны параметры асимметрии индикатрисы Хеньи-Гринштейна, использованные в расчётах

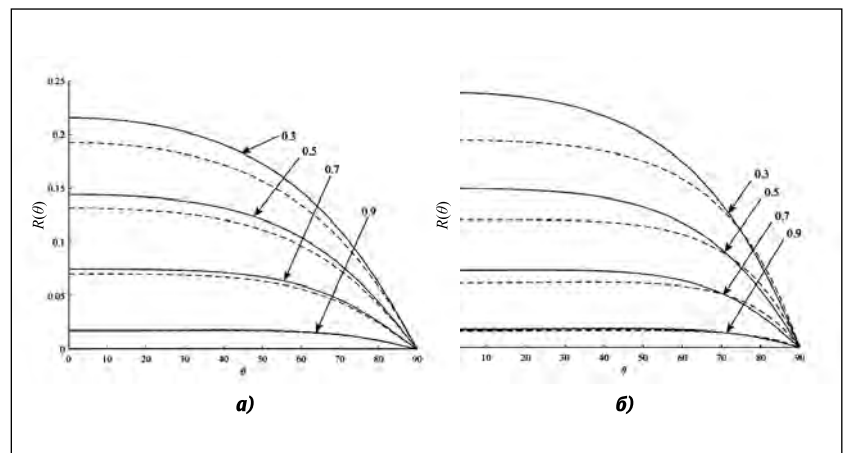
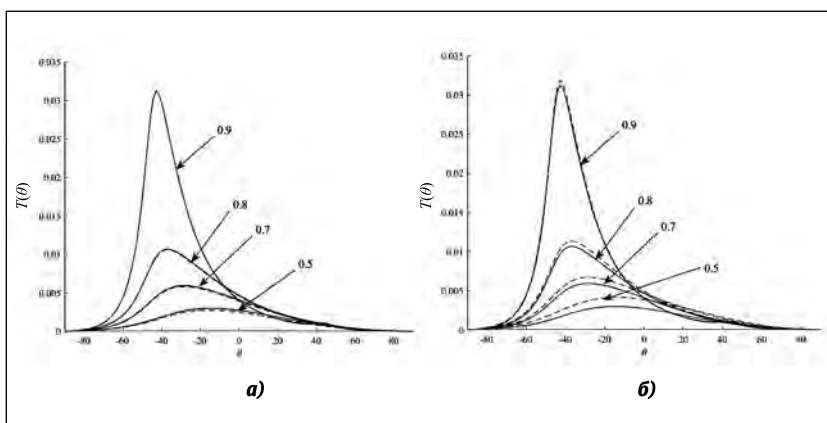


Рис. 2. Функции пропускания для слоёв толщиной  $0,1l_{tr}$ , измеряемой в длинах транспортного пробега. На графиках *a* демонстрируется влияние нелинейного слагаемого на значение функции пропускания. Сплошная линия – расчёт с учётом нелинейного слагаемого, штриховая линия – расчёт без учёта нелинейного слагаемого. На графиках *б* указан рост погрешности малоуглового приближения с уменьшением вытянутости индикатрисы. Сплошная линия – численное решение (по программе «MDOM»), штриховая линия – малоугловое приближение. Угол зондирования –  $45^\circ$ , альбеда однократного рассеяния –  $0,54$ . Стрелками указаны параметры асимметрии индикатрисы Хеньи-Гринштейна, использованные в расчётах



тематически некорректных задач наиболее последовательным и надёжным методом – процедурой подбора [26, 27].

В настоящей работе будут представлены методы численного решения уравнений Chandrasekhara. Сегодня для описания энергетических и угловых спектров электронной спектроскопии в основном используется моделирование методом Монте-Карло (МК) [28, 29]. МК-вычисления требуют больших затрат времени: на стандартном ноутбуке это время составляет десятки минут. Те же вычисления на том же ноутбуке, который использовался для МК-вычислений, на основе численного решения уравнений Chandrasekhara, представленного в настоящей работе ниже, занимают доли секунды. Идея использования численных методов для интерпретации спектров электронной спектроскопии заимствована из оптической теории переноса.

Апробация развитых в работе приближённых малоугловых методов проводится как на основе сравнения с точными численными решениями, так и – сравнения с экспериментальными данными.

### Уравнения Chandrasekhara для функций отражения и пропускания, процедура линеаризации, решение в малоугловом приближении

Выпишем уравнение для функции отражения, полученное для слоя конечной толщины  $z$  в работе [19]:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \tau} \rho_m(\tau, \mu, \mu_0) + \left( \frac{1}{\mu} + \frac{1}{\mu_0} \right) \rho_m(\tau, \mu, \mu_0) = \\ = \Lambda x_m(\mu, \mu') + \Lambda \int_0^1 x_m(\mu, \mu') \rho_m(\tau, \mu', \mu_0) \frac{d\mu'}{\mu'} + \\ + \Lambda \int_{-1}^0 \rho_m(\tau, \mu, \mu') x_m(\mu', \mu_0) \frac{d\mu'}{\mu'} + \\ + \Lambda \int_0^1 \int_{-1}^0 \rho_m(\tau, \mu, \mu') x_m(\mu', \mu'') \rho_m(\tau, \mu'', \mu_0) \frac{d\mu'}{\mu'} \frac{d\mu''}{\mu''}, \end{aligned} \quad (4)$$

где  $\tau$  – безразмерная толщина слоя, индекс  $m$  определяет азимутальную зависимость функций отражения  $\rho_m$  и индикатрисы рассеяния  $x_m(\mu', \mu'')$ ,  $\Lambda = \sigma_{el}' / (\sigma_{el} + \sigma_{in})$  – альбеда однократного рассеяния. Причём

$$\rho(\tau, \mu, \mu_0, \varphi - \varphi_0) = \sum_m \rho_m(\tau, \mu, \mu_0) \exp[im(\varphi - \varphi_0)], \quad (5)$$

где  $\theta_0 = \arccos \mu_0$ ,  $\varphi_0$  и  $\theta = \arccos \mu$ ,  $\varphi$  – зенитные и азимутальные углы падения и вылета электронов из мишени, определённые относительно оси, перпендикулярной поверхности и направленной вглубь мишени.

Аналогичное уравнению (4) уравнение для функции пропускания  $T(\tau, \mu, \mu_0, \varphi - \varphi_0)$  имеет вид

$$\begin{aligned} \frac{1}{\mu} T_m(\tau, \mu, \mu_0) + \frac{\partial T_m(\tau, \mu, \mu_0)}{\partial \tau} = \Lambda \exp\left(-\frac{\tau}{\mu_0}\right) x_m(\mu, \mu_0) + \\ + \Lambda \int_0^1 x_m(\mu, \mu') T_m(\tau, \mu', \mu_0) \frac{d\mu'}{\mu'} + \\ + \Lambda \exp\left(-\frac{\tau}{\mu_0}\right) \int_0^1 \rho_m(\tau, \mu, \mu') x_m(\mu', \mu_0, \varphi' - \varphi_0) \frac{d\mu'}{\mu'} + \\ + \Lambda \int_0^1 \int_0^1 \rho_m(\tau, \mu, \mu') x_m(\mu', \mu'', \varphi' - \varphi'') T_m(\tau, \mu'', \mu_0, \varphi'' - \varphi_0) \frac{d\mu'}{\mu'} \frac{d\mu''}{\mu''}. \end{aligned} \quad (6)$$

### Численное решение уравнений для функций отражения и пропускания

Отметим, что методы, о которых идёт речь в настоящем параграфе, впервые были развиты при решении задач оптического переноса и значительно обогатили теорию переноса электронов. Перейдём к матричной записи уравнения (1), заменив непрерывные переменные  $\mu'$  дискретным набором  $N$  значений  $\mu'_i$ , а интегралы – квадратными формулами. Тогда функция отражения  $S^m$  превратится в матрицу размерности  $N \times N$ , где  $s_i$  – веса квадратного метода,  $\mu'_i$  – узлы сетки по косинусу угла падения/наблюдения,  $w = \text{diag}(s_i/\mu_i)$ .

Уравнение (4) переписывается в виде:

Уравнение (4) переписывается в виде:

Уравнение (4) переписывается в виде:

$$\frac{\partial}{\partial \tau} \rho^m(\tau) + A \rho^m(\tau) + \rho^m(\tau) A = C + \rho^m(\tau) D \rho^m(\tau), \quad (7)$$

где  $A = \text{diag}(1/\mu) - \Lambda x^{m+} w$ ,  $C = \Lambda x^{m-}$ ,  $D = \Lambda w x^{m-} w$ .

Индекс «+» в индикатрисе указывает на описание процесса перехода нисходящего движения в нисходящее либо восходящего в восходящее, а индекс «-» показывает, что восходящее движение потока переходит в нисходящее либо наоборот.

Уравнение вида (7) носит название дифференциального алгебраического уравнения Риккати [30, 31]. Оно может быть численно решено рядом методов [31–34]. В настоящей работе используется метод *BDF* (*Backward Differential Formula*) [34]. Причём несколько упрощает ситуацию симметричность матрицы  $x^{m+}$ .

Выполнив аналогичную дискретизацию для упруго-рассеянных в слое частиц, получим матричное представление уравнения для функции пропускания:

$$\frac{\partial}{\partial \tau} T_0^m(\tau) + A' T_0^m(\tau) = C, \quad (8)$$

где  $A' = \text{diag}(1/\mu) - \Lambda x^{m+} w - \Lambda \rho_0^m(\tau) w x^{m-} w$ ,  
 $C = \Lambda(x^{m+} + \rho_0^m(\tau) w x^{m-}) \text{diag}[\exp(-\tau/\mu)]$ .

Найдём решения полученных уравнений как с учётом нелинейных слагаемых, так и решения упрощённых, т.е. линеаризованных, матричных уравнений, на основе *BDF*-метода. Воспользуемся для описания упругого рассеяния хорошо известной в оптике индикатрисой Хензи-Гринштейна. Цифры на графиках, представленных на рис. 1 и 2, показывают величину параметра асимметрии  $g$ , определяющего степень вытянутости индикатрисы Хензи-Гринштейна:

$$x_{HG}(\mu) = \frac{1 - g^2}{(1 + g^2 - 2g\mu)^{3/2}} = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1)g^l P_l(\mu), \quad (9)$$

где  $P_l$  – полиномы Лежандра.

На рис. 1 сплошными линиями представлено решение уравнения (7) (и, соответственно, (4)), пунктир – решение уравнения (7) с отброшенным нелинейным слагаемым (вторым слагаемым в правой части). Набор графиков на рис. 1 указывает на рост погрешности расчётов, выполненных на основе линеаризованных уравнений. Это очевидный результат, поскольку трудно назвать «сильно вытянутыми» индикатрисы с  $g \leq 0,5$ . Но даже в случае нарушения условия (3) линеаризованные уравнения дают результат, ошибка которого  $\leq 10\%$ .

На рис. 2 сплошными линиями представлено решение уравнения (8), а пунктир – решение уравнения (8) с отброшенными слагаемыми, которые включают функцию отражения  $\rho_0^m(\tau)$ . Иными словами, это решение уравнения (6), в котором пренебрегается последними двумя слагаемыми в правой части.

### Аналитические решения линеаризованных уравнений для функций отражения и пропускания

Проведённый анализ, выполненный на основе численных решений, указывает на то, что для «сильно вытянутых индикатрис» (см. условие (3)) возможно описание процессов отражения и прохождения частиц и излучения сквозь слой на основе следующих уравнений:

$$\frac{\partial}{\partial \tau} \rho_m(\tau, \mu, \mu_0) + \left( \frac{1}{\mu} + \frac{1}{\mu_0} \right) \rho_m(\tau, \mu, \mu_0) = \Lambda x_m(\mu, \mu') + \Lambda \left( \frac{1}{\mu} + \frac{1}{\mu_0} \right) \int_0^1 x_m(\mu, \mu') \rho_m(\tau, \mu', \mu_0) \frac{d\mu'}{\mu'} \quad (10)$$

и

$$\frac{1}{\mu} T_m(\tau, \mu, \mu_0) + \frac{\partial T_m(\tau, \mu, \mu_0)}{\partial \tau} = \Lambda \exp\left(-\frac{\tau}{\mu_0}\right) x_m(\mu, \mu_0) + \Lambda \int_0^1 x_m(\mu, \mu') T_m(\tau, \mu', \mu_0) \frac{d\mu'}{\mu'}. \quad (11)$$

Метод сферических гармоник основан на представлении функций в виде рядов по полиномам Лежандра. Однако для использования метода сферических гармоник (стандартной процедуры аналитического решения уравнений вида (10) и (11), основанной на свойстве ортогональности полиномов Лежандра на отрезке  $[-1, 1]$ ) необходимо выполнять аналитическое продолжение подынтегральных выражений на область  $(0, -1)$ . Если для уравнения (10) это действие тривиально, т.к. в области  $(0, -1)$  величина подынтегрального выражения в силу условия (3) стремится к нулю, то аналитическое продолжение для уравнения (11) – нетривиальная процедура. Существует целый ряд подходов к решению этой задачи (например, представленных в работе [2]), но наиболее эффективный описан нами в работах [35, 36].

Решение уравнения (11), в котором в интегральном слагаемом в силу аналитического продолжения пределы интегрирования находятся в интервале от  $-1$  до  $+1$ , будем искать, используя идеологию С. Гаудсмита и Д. Саундерсена: считая  $\mu$  и  $\mu_0$  константами, соответственно, во множителе  $1/\mu$  в первом слагаемом левой части (11) и в показателе экспоненты в первом слагаемом правой части этого уравнения (в отношении  $\tau/\mu_0$ ). Это приближение эквивалентно замене реального пробега на проективный. Наибольшая погрешность наблюдается, когда транспортный пробег фотона или электрона  $l_{tr} = n^{-1}(\sigma_{el} + \sigma_{in})^{-1}$  соизмерим со средним пробегом электрона между упругими соударениями  $l_{el} = 1/(n\sigma_{el})$ . Отметим, что в случае индикатрисы Хензи-Гринштейна

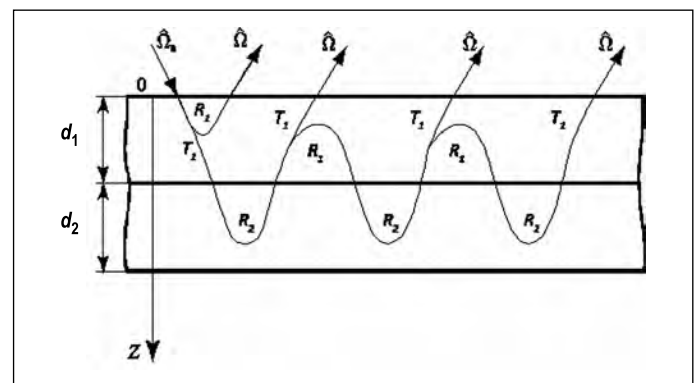


Рис. 3. Двуслойная модель отражения. Обозначения:  $\Omega = (\mu, \varphi)$ ;  $T = d(\sigma_{el} + \sigma_{in})$ ; полукруг – функция отражения, прямая – функция пропускания

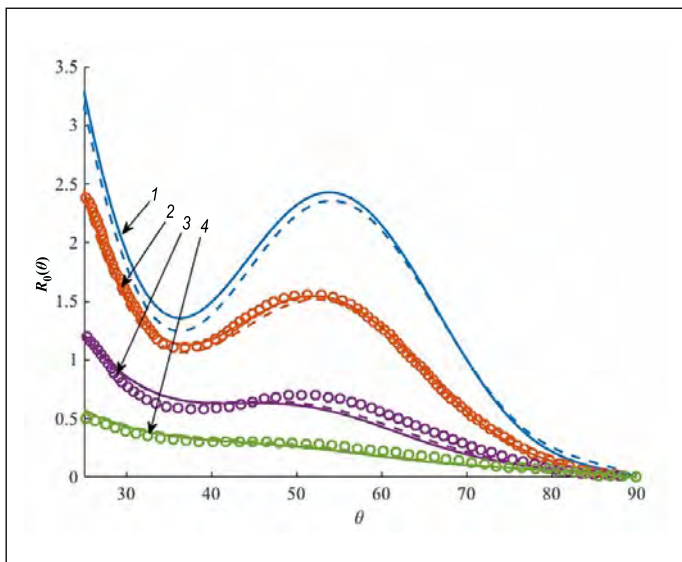


Рис. 4. Угловые распределения электронов, отражённых от золотой мишени, покрытой слоями бериллия разной толщины. Сплошная линия – точное численное решение уравнений (7) и (8), штриховая линия – расчёт в малоугловом приближении, формулы (13) и (14). Круги – экспериментальные данные [10]. Расчётные толщины слоя бериллия, напылённого на золото: 1 – 0 нм; 2 – 0,5 нм; 3 – 2,5 нм; 4 – 3,8 нм

$$l_r / l_{el} = \sigma_{el} / (\sigma_{el} + \sigma_{in}) = 1 / (1 - g). \quad (12).$$

При  $l_r / l_{el} \gg 1$  мы получаем ошибку  $\leq 5\%$ .

С учётом сделанных допущений после подстановки разложений функций по полиномам Лежандра в уравнение (11) получаем систему разделяющихся дифференциальных уравнений, решение которой при начальном условии  $T_{lm}(\tau) = 1$  имеет вид

$$T(\tau, \mu, \mu_0) = \frac{\Lambda \mu \mu_0}{2} \sum_l \frac{2l+1}{2} x_l P_l(\mu_0 \rightarrow \mu) \times \left[ \frac{e^{-\tau/\mu} - e^{-(1-\Lambda x_l)\tau/\mu_0}}{(\mu - \mu_0) - \Lambda x_l \mu} + \frac{e^{-\tau/\mu_0} - e^{-(1-\Lambda x_l)\tau/\mu}}{(\mu_0 - \mu) - \Lambda x_l \mu_0} \right]. \quad (13)$$

Уравнение (10) решается методом итераций, который позволяет наиболее последовательно определять процедуру аналитического продолжения. Она подробно описана в работах [35, 36] и приводит к следующему результату:

$$\rho(\tau, \mu, \mu_0) = \frac{\mu \mu_0}{\mu + \mu_0} \sum_l \frac{2l+1}{2} x_l P_l(\mu_0 \rightarrow \mu) \times \left[ E_1\left(\tau \frac{\mu + \mu_0}{\mu \mu_0}\right) - E_1\left((1 - \Lambda x_l) \tau \frac{\mu + \mu_0}{\mu \mu_0}\right) - \ln(1 - \Lambda x_l) \right], \quad (14)$$

где  $E_1(x) = \int_x^\infty t^{-1} e^{-t} dt$  – интегральная экспонента.

На рис. 1 и 2 представлено сравнение точных численных решений уравнения с решениями в малоугловом приближении.

### Отражение от многослойных структур

Эту ситуацию мы будем обсуждать на примере угловых распределений электронов, упруго отражённых от твёрдых тел. В литературе имеются экспериментальные данные по угловым распределениям электронов, отражённых как от однородных образцов, так и от многослойных [9–10, 37–42].

Рассмотрим двуслойную мишень (рис. 3). В соответствии с представленной схемой функция отражения от этой мишени представима в виде

$$R_{12m}(\tau_1, \tau_2, \mu_0, \mu) = R_{1m}(\tau_1, \mu_0, \mu) + \int_{-1}^1 d\mu' \int_{-1}^1 d\mu'' T_{1m}(\tau_1, \mu_0, \mu') R_{2m}(\tau_2, \mu', \mu'') \times T_{1m}(\tau_1, \mu'', \mu), \quad (15)$$

или, в силу односкоростного и малоуглового приближения,–

$$R_{12m}(\tau_1, \tau_2, \mu_0, \mu) = R_{1m}(\tau_1, \mu_0, \mu) + \int_{-1}^1 d\mu' T_{1m}(\tau_1(1/\mu_0 + 1/\mu), \mu_0, \mu') \times R_{2m}(\tau_2, \mu', \mu). \quad (16)$$

Расчёт для трёхслойной мишени можно вести на основе выражения, аналогичного формуле (16):

$$R_{123lm}(\tau_1, \tau_2, \tau_3) = R_{1lm}(\tau_1) + R_{23lm}(\tau_2, \tau_3) \times \exp\left[-(1 - \Lambda x_{lm}) \tau_1 (\mu^{-1} + \mu_0^{-1})\right],$$

где  $R_{23lm}(\tau_2, \tau_3)$  вычисляется на основе формулы (16) с соответствующей заменой индексов:  $1 \rightarrow 2$  и  $2 \rightarrow 3$ .

На рис. 4 представлены результаты расчётов угловых распределений электронов, упруго отражённых от «бутерброда»  $Be/Au$ , выполненные на основе точных численных решений и с использованием малоуглового решения (16).

### Заключение. Основные результаты

В статье представлен ряд аналитических решений, позволяющих с удовлетворительной точностью описывать прохождение и отражение излучения от мутных сред. Полученные решения составляют набор инструментов, позволяющих описывать рассеяние излучения в слоисто-неоднородных средах. В основе развиваемого в работе подхода лежат методы, которые возникли при решении оптических задач со сферической или релеевской индикатрисами рассеяния, а также методы, созданные В.А. Амбарцумяном, С. Чандрасекаром, В.В. Соболевым и другими замечательными учёными, решавшими задачи рассеяния

света в атмосферах звёзд и планет. В статье показано, что созданные в работах [17–20] методы прекрасно работают и в задачах, в которых индикатриса рассеяния «сильно вытянута вперёд» (см. условие (3)).

Наличие аналитических решений типа и позволяет выполнять вычисления с высокими скоростью и точностью, обеспечивая возможность отслеживать значения ошибки как функции основных характеристик рассеяния: параметров индикатрисы (параметр  $g$  в случае индикатрисы Хенни-Гринштейна) и альbedo однократного рассеяния.

Скорость вычислений – важный фактор при решении обратных задач. Например, когда рассматривается отражение от многослойных структур, необходимое определение толщины слоёв производится методом подбора (*fitting*), в котором многократно решается прямая задача.

Благодаря применению численных методов фотометрической теории светового поля в задачах рассеяния электронов при определении послонных профилей изотопов водорода методом спектроскопии пиков упруго-отражённых электронов (СПУЭ) удалось на порядок повысить чувствительность метода, достигнув актуальной для задач управляемого термоядерного синтеза чувствительности на уровне 10 % изотопов водорода в материале, обращённом к плазме [43].

Использование методик оптической теории переноса для физической интерпретации эффектов рассеяния электронов и ионов привело к появлению в электронной и ионной спектроскопии «оптических» терминов вроде «поворот тела яркости» и «подстилающая поверхность» [44]. Авторы настоящей работы уверены, что представленные малоугловые решения найдут применение при решении задач рассеяния света в мутных средах и в задачах оптики моря.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Векленко Б.А. Природа фотона и квантовая оптика // Светотехника.– 2018.– № 1. – С. 7–14.
2. Beer A. Bestimmung der Absorption des rothen Lichts in farbigen Flüssigkeiten // Annal. Phys. Chem.– 1852. – Vol. 86. – P. 78–88.
3. Dashen R.F. Theory of electron backscattering // Phys. Rev.– 1964. – Vol. 134. – P. 1025–1032.
4. Afanas'ev V.P., Naujoks D. Backscattering of fast electrons // Phys. Stat. Sol.– 1990. – Vol. 164. – P. 133–140.
5. Borodyansky S. Effects of elastic scattering on energy spectra of emitted and backscattered electrons // Surf. Interface. Anal.– 1993. – Vol. 84. – P. 811–814.
6. Hofmann S. Auger- and X-Ray Photoelectron Spectroscopy in Materials Science. –Berlin/Heidelberg: Springer, 2013.
7. Powell C.J., Jablonski A. Progress in quantitative surface analysis by X-ray photoelectron spectroscopy: Current status and perspectives // J. of Electron Spectros. Relat. Phenom.– 2010. – Vol. 178–179. – P. 331–346.
8. Капля П.С. Создание высокоточных методов анализа твёрдых тел на основе расшифровки данных электронной спектроскопии методами инвариантного погружения / Дис. ... к-та физ.-мат. наук, 2016. DOI: 10.13140/RG.2.1.3428.8246.
9. 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. физическая.– 1985. – Т. 49.– № 9. – С. 1755–1759.
10. Бронштейн И.М., Пронин В.П. Упругое рассеяние электронов средних энергий металлическими плёнками // Физика твёрдого тела.– 1975. – Т. 17. – С. 2431–2433.
11. Gergely G. Elastic backscattering of electrons: determination of physical parameters of electron transport processes by elastic peak electron spectroscopy // Prog. Surf. Sci.– 2002. – Vol. 71. – P. 31–88.
12. Doicu A., Trautmann T. Discrete-ordinate method with matrix exponential for a pseudo-spherical atmosphere: Scalar case // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer.– 2009. Vol. 110. – P. 146–158.
13. Spurr R.J.D., Kurosu T.P., Chance K.V. A linearized discrete ordinate radiative transfer model for atmospheric remote-sensing retrieval // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer.– 2001. – Vol. 68.– № 6. – P. 689–735.
14. Stamnes K., Tsay S., C., Wiscombe W., Jayaweera K. Numerically stable algorithm for discrete-ordinate-method radiative transfer in multiple scattering and emitting layered media // Appl. Opt.– 1988. – Vol.27. – P. 2502–2509.
15. Budak V.P., Korkin S.V. Complete matrix solution of radiative transfer equation for pile of horizontally homogeneous slabs // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer.– 2011. – Vol. 112. – P. 1141–1148.
16. Афанасьев В.П., Будак В.П., Ефременко Д.С., Лубенченко А.В. Угловые распределения электронов и лёгких ионов, упруго отражённых от поверхности твёрдого тела // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования.– 2010.– № 6. – С. 34–39.
17. Амбарцумян В.А. Новый способ расчёта рассеяния света в мутной среде // Изв. АН Арм. ССР. Сер. геогр. и геофиз.– 1942. – Вып. 3. – С. 97–106.
18. Амбарцумян В.А. К задаче о диффузном отражении света // Журнал экспериментальной и теоретической физики.– 1943. – Т. 13, вып. 9–10. – С. 323–334.
19. Chandrasekhar S. Radiative transfer. – London: Oxford University Press, 1950.
20. Соболев В.В. Рассеяние света в атмосферах планет. – М.: Наука, 1972.
21. Goudsmit S., Saunderson J.L. Multiple scattering of electrons // Phys. Rev.– 1940. – Vol. 57. – P. 24–29.
22. Goudsmit S., Saunderson J.L. Multiple scattering of electrons. II // Phys. Rev.– 1940. – Vol. 58. –P.36–42.
23. Scott W. Theory of Small-Angle Multiple Scattering of Fast Charged Particles // Rev. of Modern Phys.– 1963. – Vol. 35. – P. 231–313.
24. Афанасьев В.П. Элементарные процессы и кинетика высокотемпературной неравновесной плазмы. – М.: Изд. МЭИ, 1988.
25. Амбарцумян В.А. К вопросу о диффузном отражении света мутной средой // Доклады Академии наук СССР.– 1943. – Т. 38.– № 8. – С. 257–261.
26. Afanas'ev V.P., Golovina O. Yu., Gryazev A.S., Efremenko D.S., Kaplya P.S. Photoelectron spectra of finite-thickness layers // Journal of Vacuum Science & Technology B.– 2015. – Vol. 33. – P. 03D101.
27. 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. – Vol. 136. – P. 146–155.
28. Werner W.S.M. Differential probability for surface and volume electronic excitations in Fe, Pd and Pt // Surface Science. – 2005. – Vol. 588. – P. 26–40.
29. Werner W.S.M. Analysis of reflection electron energy loss spectra (REELS) for determination of the dielectric function of solids: Fe, Co, Ni // Surface Science. – 2007. – Vol. 601, No. 10. – P. 2125–2138.
30. Bellman R, Kalaba R, Wing G. Invariant imbedding and mathematical physics. I. Particle processes // J. Math. Phys.– 1960. – Vol. 1. – P. 280–308.
31. Flatau P.J, Stephens G.L. On the fundamental solution of the radiative transfer equation // J. Geophys. Res.– 1988. –Vol. 93(D9). – P. 11037–11050.
32. Waterman P.C. Matrix-exponential description of radiative transfer // J. Opt. Soc. Am. –1981. –Vol. 71(4). – P. 410–422.
33. Efremenko D.S., Molina Garcia V., Gimeno Garsia S., Doicu A. A review of the matrix-exponential formalism in radiative transfer // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer.– 2017. – Vol. 196. – P. 17–45.

34. Pienado J., Ibañez J., Hernández V., Arias E. A family of BDF algorithms for solving Differential Matrix Riccati Equations using adaptive techniques // Procedia Computer Science. – 2010. – Vol. 1. – P. 2569–2577.

35. 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 // Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena. – 2016. – Vol. 210. – P. 16–29.

36. Афанасьев В.П., Капля П.С., Лисицына Е.Ю. Малоугловое приближение и модель Освальда-Каспера-Гауклера в задачах отражения электронов от твёрдых тел // Поверхность. Рентгеновские синхротронные и нейтронные исследования. – 2016. – № 3. – С. 66–71.

37. Jablonski A., Hansen H.S., Jansson C., Tougaard S. Elastic electron backscattering from surfaces with overlayers // Phys. Rev.B. – 1992. – Vol. 45. – P. 3694–3702.

38. Jablonski A. Elastic electron backscattering from gold // Phys. Rev.B. – 1991. – Vol. 43. – P. 7546–7554.

39. Jablonski A., Jansson C., Tougaard S. Elastic electron backscattering from surfaces: Prediction of maximum intensity // Phys. Rev. B. – 1993. – Vol. 47. – P. 7420–7430.

40. Zommer L., Lesiak B., Jablonski A. Energy dependence of elastic electron backscattering from solids // Phys. Rev.B. – 1993. – Vol. 47. – P. 13759–13762.

41. Kuzovlev A.I., Kurnaev V.A., Remizovich V.S., Trifonov N.N. Refraction of the beam of charged particles during inclined transmission through a thin target // Nucl. Instrum. and Methods. Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms. – 1998. – Vol. 135. – P. 477–481.

42. Бронштейн И.М., Пронин В.П. Упругое отражение электронов средних энергий при напылении Ве на Au // XXVIII Герценовские чтения. Физическая и полупроводниковая электроника. – Л.: Изд-во ЛГПИ им. А.И. Герцена, 1975. – С. 18–20.

43. Afanas'ev V.P., Gryazev A.S., Kaplya P.S., Köppen M., Ridzel O.Y., Subbotin N.Y., Hansen P. Investigation of Deuterium Implantation into Beryllium Sample by Electron Energy Loss Spectroscopy // IOP Conf. Series: Journal of Physics: Conf. Series. – 2017. – Vol. 891. – P. 012303(1–6).

44. Афанасьев В.П., Капля П.С. Функция пропускания. Эффект «поворота тела яркости» // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. – 2017. – № 12. – С. 66–75.



**Афанасьев Виктор Петрович**, доктор физ.-мат. наук, доцент. Окончил в 1970 г. МЭИ. Профессор кафедры «Общая физика и ядерный синтез» НИУ «МЭИ». Член трёх диссертационных советов. Эксперт РАН и ФАНО



**Будак Владимир Павлович**, доктор техн. наук, профессор. Окончил в 1981 г. МЭИ. Главный редактор журнала «Светотехника» / «Light & Engineering» и профессор кафедры светотехники НИУ «МЭИ». Действительный член РАЭН



**Ефременко Дмитрий Сергеевич**, доктор техн. наук (2017 г.). Окончил в 2009 г. МЭИ (ТУ). Работает в Институте дистанционного зондирования Германского центра авиации и космонавтики (DLR) и читает лекции в Техническом университете Мюнхена (TU München) по дисциплинам «Вычислительная электродинамика» и «Нелинейная оптимизация»



**Капля Павел Сергеевич**, кандидат физ.-мат. наук (2016 г.). Окончил в 2012 г. НИУ «МЭИ». Сотрудник компании «Яндекс»

## ПАРТНЁРЫ ЖУРНАЛА

Редколлегия и редакция с большим удовлетворением отмечают организацию сообщества «Партнёры журнала «Светотехника» и выражают благодарность нашим партнёрам, поверившим во взаимную эффективность такого сотрудничества



ХОЛДИНГ **BL GROUP**



**enercom**<sup>®</sup>  
СОЗДАЕМ ЛИДЕРОВ В ЭНЕРГОСБЕРЕЖЕНИИ

