

На правах рукописи

Бакалейников Леонид Александрович

**ПЕРЕНОС ЭЛЕКТРОНОВ СРЕДНИХ ЭНЕРГИЙ В ВЕЩЕСТВЕ И  
СВОЙСТВА НЕЛИНЕЙНОГО ИНТЕГРАЛА СТОЛКНОВЕНИЙ  
УРАВНЕНИЯ БОЛЬЦМАНА**

(01.04.04 - физическая электроника)

Автореферат  
диссертации на соискание ученой степени  
доктора физико-математических наук

Санкт-Петербург – 2012

Работа выполнена в Федеральном государственном бюджетном учреждении науки **Физико-техническом институте им. А. Ф. Иоффе Российской академии наук**

Консультант: доктор физико-математических наук, профессор, Эндер Андрей Яковлевич

Официальные оппоненты:

Баскин Лев Мордухович, доктор физико-математических наук, профессор, Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Санкт-Петербургский государственный университет телекоммуникаций им. проф. М.А.Бонч-Бруевича», заведующий кафедрой «Высшая математика»

Горбачев Юрий Евгеньевич, доктор физико-математических наук, старший научный сотрудник, ООО «Геолинк Текнолоджис», Руководитель отдела исследований

Брунков Павел Николаевич, доктор физико-математических наук, Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе Российской академии наук, ведущий научный сотрудник

Ведущая организация: Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет «ЛЭТИ» им. В. И. Ульянова (Ленина)»

Защита состоится “28” марта 2013 г. в 14 часов на заседании диссертационного совета Д 002.205.03 по защите диссертаций на соискание ученой степени доктора физико-математических наук при Физико-техническом институте им. А.Ф. Иоффе по адресу: 194021 г. Санкт-Петербург, Политехническая ул. д. 26.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Физико-технического института им. А.Ф.Иоффе РАН

Автореферат разослан “\_\_\_\_\_” \_\_\_\_\_ 2012 г.

Ученый секретарь  
диссертационного совета

А.М.Красильщиков

## **ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ**

### **Актуальность темы**

Многие современные прикладные и технические проблемы приводят к необходимости исследования процессов взаимодействия потоков частиц с веществом. Такая необходимость возникает, например, при рассмотрении процессов обработки поверхностей, в полупроводниковой технологии, при использовании пучков для модификации физических свойств материалов. Особое значение для разработки новых материалов и технологий имеет использование пучков частиц для решения задач диагностики. Стремление к созданию структур со сверхмалыми размерами активных областей приводит к необходимости разработки диагностических методов, позволяющих определять параметры исследуемых объектов с высоким разрешением.

Для широкого класса современных диагностических методов ключевой проблемой является проблема транспорта электронов средних энергий. Теоретической основой для описания транспорта электронов служит кинетическое уравнение, решение которого представляет собой сложную математическую задачу. В связи с этим были предложены различные приближенные формы кинетического уравнения, позволяющие выявить отдельные черты процесса переноса. Наличие большого количества таких приближений и отсутствие четких критериев их пригодности при рассмотрении транспорта электронов средних энергий ставит вопрос об определении областей применимости и классификации приближенных форм кинетического уравнения. Такая классификация оказывается возможной при выявлении малых параметров задачи и использовании методов теории возмущений. Более того, асимптотический подход позволяет выявить структуру решения, провести его полный качественный анализ и найти приближенное решение.

Развитие технологии непрерывно повышает требования к точности количественных оценок эффектов, происходящих при взаимодействии электронов с веществом. Это приводит к тому, что качественных закономерностей процесса переноса, даваемых приближенными моделями, оказывается недостаточно для отыскания распределения электронов с необходимой точностью. Поэтому наряду с развитием асимптотического подхода к исследованию кинетического уравнения для электронов оказалась необходимой разработка численных методов его решения. Разработка численных методов решения уравнения Больцмана при сильном отклонении функции распределения (ФР) от равновесия является общей проблемой и в кинетической теории газов. При изучении, например, кинетических режимов в пристеночных областях, где ФР оказывается сильно неравновесной, метод описания процессов переноса, основанный на решении линеаризованного уравнения Больцмана – метод Чепмена-Энскога - плодотворно развивавшийся более полувека, оказывается неприменимым, и возникает необходимость в решении нелинейного кинетического уравнения. Серьезные трудности возникают и при применении численных методов, широко используемых для

решения задач кинетической теории газов, к расчету функции распределения в области больших скоростей. В то же время информация о поведении ФР в этой области оказывается определяющей при изучении химических реакций, процессов возбуждения, ионизации и других неупругих процессов. В связи с этим изучение структуры интеграла столкновений и развитие новых подходов к решению нелинейного уравнения Больцмана представляется важной и актуальной задачей.

Стремление к реалистической постановке задачи и к более точному учету особенностей процесса переноса электронов в веществе и регистрации сигнала заставляет использовать для решения кинетического уравнения метод прямого численного моделирования – метод Монте Карло. Создание удобного инструмента расчета электронного распределения на основе этого метода имеет большое практическое значение.

Таким образом, разработка асимптотического и численного методов в задачах транспорта электронов средних энергий и развитие методов решения кинетического уравнения при сильном отклонении функции распределения от равновесия представляет как фундаментальный научный, так и практический интерес, что и обеспечивает актуальность выбранной темы диссертации.

#### **Цели и задачи работы.**

*Целью работы* является разработка асимптотического и численного методов решения кинетического уравнения для электронов средних энергий и развитие метода разложения по сферическим гармоникам при сильном отклонении функции распределения от равновесия.

Заметим, что реализация асимптотического подхода к решению кинетического уравнения для электронов средних энергий требует выделения малых параметров в задаче. Эти параметры могут быть найдены при анализе дифференциальных сечений рассеяния и характерных длин различных процессов.

Развитие метода разложения по сферическим гармоникам требует глубокого исследования структуры и свойств нелинейного интеграла столкновений. Как известно, интеграл столкновений может быть представлен в виде интеграла от ядра,  $G(\vec{v}, \vec{v}_1, \vec{v}_2)$ , зависящего от трех векторных скоростей  $\vec{v}$ ,  $\vec{v}_1$ ,  $\vec{v}_2$ , умноженного на произведение функций распределения от  $\vec{v}_1$  и  $\vec{v}_2$ . Именно расчет этого шестикратного интеграла представляет наибольшую сложность при решении уравнения Больцмана. Разложение ФР по сферическим гармоникам приводит к замене интеграла столкновений набором интегральных операторов, ядра которых  $G_{l_1 l_2}^l(v, v_1, v_2)$  зависят лишь от модулей скоростей  $v$ ,  $v_1$ ,  $v_2$  и целочисленных индексов  $l$ ,  $l_1$ ,  $l_2$ .

Разработка метода прямого моделирования транспорта электронов по методу Монте-Карло требует вычисления дифференциальных сечений упругого и неупругого рассеяния и реализации алгоритма расчета распределения электронов.

Сформулируем теперь конкретные задачи, которые необходимо было решить в работе.

1. Выполнить анализ дифференциального сечения рассеяния электронов средних энергий, сравнить характерные длины различных процессов, происходящих при распространении электронов в веществе и выделить малые параметры задачи;
2. Провести асимптотическое разложение упругой и неупругой частей интеграла столкновений по выделенным в дифференциальных сечениях рассеяния параметрам малости;
3. Выявить структуру решения кинетического уравнения для электронов (типы и расположение пограничных слоев) на основе выделения разномасштабных процессов и применения методов сингулярной теории возмущений;
4. Разработать алгоритм построения асимптотических разложений для полученной цепочки задач;
5. Выявить связи между матричными элементами (МЭ) в стандартном моментном методе и ядрами интеграла столкновений  $G_{l_1 l_2}^l(v, v_1, v_2)$ , возникающими при использовании разложения по сферическим гармоникам, и провести исследование асимптотики МЭ при больших индексах;
6. Разработать процедуру построения линейных ядер интеграла столкновений на основе линейных МЭ для различных потенциалов взаимодействия;
7. Исследовать общие свойства ядер интегралов прямых и обратных столкновений;
8. Найти связи между ядрами и разработать рекуррентную процедуру их отыскания на основе использования свойства инвариантности интеграла столкновений относительно выбора скорости системы отсчета;
9. Применить разработанную процедуру для построения ядер в аналитической форме для некоторых сечений взаимодействия и использовать их для решения модельных задач нелинейной релаксации;
10. Рассчитать ядра и использовать их для решения задач линейной кинетики электронов;
11. Разработать и реализовать алгоритмы расчета дифференциальных сечений рассеяния и численного моделирования кинетики электронов средних энергий по методу Монте-Карло;
12. Применить разработанные методы расчета распределения электронов к решению некоторых прямых и обратных диагностических задач.

**Научная новизна полученных результатов.**

1. Разработан метод решения кинетического уравнения для электронов средних энергий, основанный на использовании схемы асимптотического расщепления многомасштабных задач.
2. Впервые получена аналитическая структура решения кинетического уравнения для электронов средних энергий в мишенях с большими атомными номерами, облучаемых электронным зондом. Для получения этой структуры выявлены малые параметры задачи и использованы методы асимптотического анализа.

3. Проведено обобщение способа асимптотического разложения интегралов с  $\delta$ -образным ядром, убывающим степенным образом, на случай зависимости ядра от медленной переменной. Полученный результат использован для выполнения корректного разложения неупругой части интеграла столкновений.
4. Впервые найдена асимптотика линейных и нелинейных матричных элементов (МЭ) интеграла столкновений, возникающих при применении моментного метода к решению нелинейного уравнения Больцмана.
5. Впервые предложен способ построения ядер линейного интеграла столкновений, возникающих при разложении функции распределения по сферическим гармоникам, основанный на прямом суммировании произведений МЭ на полиномы Сонина и отыскании асимптотики остатка ряда. Разработанный метод асимптотической оценки остатка ряда позволяет рассчитывать ядро с высокой точностью при использовании лишь нескольких десятков членов ряда.
6. Впервые на основе инвариантности интеграла столкновений относительно скорости системы отсчета найдены связи между ядрами нелинейного интеграла столкновений. С помощью этих соотношений построены рекуррентные соотношения для последовательного определения ядер.
7. Впервые найдены явные аналитические выражения для нескольких первых ядер нелинейного интеграла столкновений для газа из твердых шаров и псевдомаксвелловских молекул.
8. Впервые показано, что использование найденных ядер в задачах однородной нелинейной изотропной релаксации приводит к корректным результатам и в случае нарушения условия сходимости разложения ФР в стандартном моментном методе.

### **Научная и практическая значимость**

Основная научная ценность работы заключается в том, что в ней:

1. Для электронов средних энергий, распространяющихся в веществе, получено асимптотическое разложение неупругой части интеграла столкновений и исследован спектр упругой части для оценки применимости дифференциальных приближений.
2. Для электронов средних энергий в однородных тяжелых мишенях разработан алгоритм построения асимптотического разложения решения кинетического уравнения.
3. Установлены области применимости различных упрощенных моделей кинетического уравнения, используемых для отыскания распределения электронов, и найдены связи между этими моделями.
4. Выявлена структура решения задачи о релаксации пучка электронов средних энергий в полубесконечных тяжелых мишенях.
5. Получены связи между ядрами интеграла столкновений  $G_{l_1 l_2}^l(v, v_1, v_2)$ , возникающими при использовании метода разложения по сферическим гармоникам. Эти связи являются следствием инвариантности нелинейного интеграла столкновений по отношению к выбору скорости системы отсчета и представляют собой дифференциальные соотношения.

6. Разработана рекуррентная процедура последовательного отыскания ядер  $G_{i_1, i_2}^l(v, v_1, v_2)$  на основе найденных связей.

7. Показано, что полученные ядра позволяют решать задачу нелинейной релаксации в случае сильного отклонения ФР от равновесия даже в том случае, когда нарушается условие сходимости разложения ФР в стандартном моментном методе.

Практическая значимость полученных результатов заключается в

1. Применении для решения задач кинетики электронов средних энергий предложенной в работе общей схемы, объединяющей различные модели кинетического уравнения и позволяющей переходить от одной из них к другой при изменении рассматриваемых масштабов длин, углов и энергий.

2. Широком использовании созданной базы данных по дифференциальным сечениям упругого и неупругого рассеяния электронов в веществе для решения разнообразных задач в области кинетики электронов средних энергий.

3. Применении разработанных численных методов моделирования кинетики электронов и созданных на их основе программных пакетов для исследования характеристик распределения электронов с энергиями 100эВ – 30 кэВ в веществе.

4. Использовании метода диагностики тонких нанометровых слоев в однородных образцах с помощью рентгеноспектрального микроанализа, разработанного на основе моделирования источников рентгеновского излучения.

5. Возможности использования для расчета интеграла столкновений ядер нелинейного интеграла столкновений, что открывает перспективу для решения задач нелинейной кинетики при сильном отклонении ФР от равновесия.

#### **Научные положения, выносимые на защиту:**

1. Путем применения общей схемы асимптотического расщепления для многомасштабной задачи переноса электронов с энергиями порядка нескольких десятков кэВ в твердом теле получены уравнения сокращенного описания кинетики электронов как в основной области, так и в пограничном слое.

2. Для уравнений меньшей размерности получены граничные условия с помощью сращивания решений в пограничном слое эффективной изотропизации и в области диффузии. Показано, что эти условия являются условиями первого рода, и их явный вид следует из координатной асимптотики решения в пограничном слое эффективной изотропизации.

3. Найдена структура решения задачи о взаимодействии пучка электронов с тяжелой мишенью на основе выделения разномасштабных процессов. С помощью асимптотического расщепления кинетического уравнения определена область применимости различных приближенных форм кинетического уравнения для электронов средних энергий в различных пограничных слоях и построена процедура сращивания асимптотических разложений.

4. Проведен анализ нелинейного интеграла столкновений уравнения Больцмана и ядер  $G_{i_1, i_2}^l(c, c_1, c_2)$ , возникающих при разложении по сферическим гармоникам. Показано, что интеграл прямых столкновений выражается через линейный

оператор. Ядра интеграла прямых столкновений выражаются через полное сечение с помощью одной квадратуры. Ядра нелинейного интеграла столкновений,  $G_{l_1, l_2}^l(c, c_1, c_2)$ , в случае степенных потенциалов обладают свойством подобия.

5. Из условия инвариантности интеграла столкновений относительно выбора скорости системы отчета найдены связи между ядрами нелинейного интеграла столкновений, которые представляют собой дифференциальные соотношения. На основе этих связей разработана рекуррентная процедура отыскания ядер  $G_{l_1, l_2}^l(c, c_1, c_2)$  по известному ядру  $G_{0,0}^0(c, c_1, c_2)$ .

6. Получены аналитические выражения для ядер нелинейного интеграла обратных столкновений  $G_{l_1, l_2}^{+l}(c, c_1, c_2)$  с суммой индексов  $l + l_1 + l_2 \leq 4$  для твердых шаров и псевдомаксвелловских молекул.

7. С помощью полученных ядер найдено решение нелинейных однородных релаксационных задач. Показано, что разработанный метод с высокой точностью описывают эволюцию ФР в области до 10 тепловых скоростей как в ситуациях, когда стандартный моментный метод может быть использован, так и в ситуациях, когда он неприменим.

8. Разработан метод решения граничных кинетических задач для электронов средних энергий на основе использования ядер интеграла столкновений и модифицированного метода дискретных ординат.

9. Разработаны базы данных по сечениям взаимодействия электронов с веществом и программные пакеты по методу Монте-Карло, которые являются гибким инструментом исследования электронного распределения в твердом теле. Использование этих пакетов приводит к адекватному описанию основных характеристик переноса электронов в области энергий 100эВ – 30 кэВ.

#### **Апробация работы.**

Результаты работы неоднократно докладывались на семинарах лаборатории прикладной математики и математической физики и лаборатории физической газодинамики ФТИ им. А.Ф.Иоффе РАН (С.-Петербург), на семинарах факультета конструирования материалов (Технион, Хайфа, Израиль), а также представлялись на отечественных и международных конференциях: XI CANAS Conference on analytical atomic spectroscopy (Moscow, USSR, July 29 – August 4, 1990), “Scanning” (Charlton, South Karolina, USA, May 17 – May 20, 1994; Monterey, Kalifornia, USA, April 10 – April 13, 1996), The 35-th Annual Meeting of the Israel Society for Microscopy (Israel, Haifa, May 15, 2001), 8-th European Workshop on Modern Developments and Applications in Microbeam Analysis EMAS-2003 (Spain, May 18 – May 22, 2003), 10-th European Workshop on Modern Developments and Applications in Microbeam Analysis EMAS-2007 (Antwerp, Belgium, May 6 – May 10, 2007), XV Российский симпозиум по растровой электронной микроскопии и аналитическим методам исследования твердых тел РЭМ-2007 (Черноголовка, 4 июня -7 июня, 2007), Всероссийский семинар по аэрогидродинамике (СПб, 5 февраля -7 февраля, 2008), VI Всероссийская конференция по рентгеноспектральному анализу (Краснодар, 5 октября -10 октября, 2008), V Поляховские чтения (СПб, 3

февраля -6 февраля, 2009), Струйные, отрывные и нестационарные течения (XXII Юбилейный семинар с международным участием, СПб, 22 июня - 25 июня, 2010), 2-й Симпозиум "Полупроводниковые лазеры: физика и технология" (СПб, 10 ноября -12 ноября 2010), 4-ый международный семинар «Вопросы математической физики и прикладной математики» (СПб, 29 сентября, 2010), 5-ый Международный семинар «Вопросы математической физики и прикладной математики», посвященный 100-летию со дня рождения профессора Н.Н.Лебедева (СПб, 15 июня, 2011).

**Публикации.** Основное содержание диссертации опубликовано в 37 работах, из них 32 статьи в рецензируемых научных журналах, рекомендованных в действующем перечне ВАК РФ и 1 авторское свидетельство.

**Структура и объем диссертации.** Диссертация состоит из введения, девяти глав, заключения, списка публикаций по теме диссертации, списка литературы из 241 наименований и изложена на 377 страницах машинописного текста, включая 82 рисунка и 29 таблиц.

### ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во **введении** обоснована актуальность темы исследований, сформулированы цель и основные задачи работы, научная новизна и практическая значимость полученных результатов и приведены научные положения, выносимые на защиту. Введение содержит краткий обзор методов решения как линейного кинетического уравнения, являющегося теоретической основой описания транспорта электронов с энергией порядка десятков килоэлектронвольт в веществе, так и нелинейного уравнения Больцмана при сильном отклонении функции распределения от равновесия.

В **главе 1** на основе анализа дифференциальных сечений взаимодействия электронов с веществом исследуются соотношения между характерными длинами процесса релаксации, выявляются малые параметры задачи и проводится ее исследование с помощью методов теории возмущений.

Распределение электронов в веществе описывается кинетическим уравнением, которое в стационарном случае в отсутствии внешних полей имеет вид

$$\vec{\Omega} \cdot \nabla_{\vec{r}} \Phi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) = \hat{I}(\Phi) \quad (1)$$

Здесь  $\Phi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E)$  – дифференциальная плотность потока, зависящая от положения электрона  $\vec{r}$ , направления его движения  $\vec{\Omega}$  и энергии  $E$ . Интеграл столкновений описывает перераспределение электронов по углам и энергиям за счет взаимодействия с атомами среды и имеет вид

$$\hat{I}(\Phi) = \int_0^{\infty} \int_{4\pi} G(E, \vec{\Omega}, E', \vec{\Omega}') \Phi(\vec{r}, \vec{\Omega}', E') d\vec{\Omega}' dE', \quad (2)$$

где

$$G(E, \vec{\Omega}, E', \vec{\Omega}') = N \frac{d^2 \sigma(E', \vec{\Omega}', E, \vec{\Omega})}{d\Omega dE} - N \Sigma(E, \vec{\Omega}) \delta(\vec{\Omega}' - \vec{\Omega}) \delta(E' - E) \quad (3)$$

- ядро интеграла столкновений. В выражении (3)  $\frac{d^2\sigma(E',\vec{\Omega}',E,\vec{\Omega})}{d\Omega dE}$  - дифференциальное сечение рассеяния,  $\Sigma(E,\vec{\Omega})$  – полное сечение рассеяния,  $N$  – концентрация рассеивателей. Для полной постановки задачи уравнение (1) должно быть дополнено граничными условиями, задающими распределение электронов, падающих на изучаемую область

$$\Phi(\vec{r},\vec{\Omega},E)_{|\vec{r}=\vec{r}_\Gamma} = \Phi_\Gamma(\vec{r}_\Gamma,\vec{\Omega},E), \quad \vec{\Omega} \cdot \vec{n}_\Gamma < 0. \quad (4)$$

Здесь  $\vec{r}_\Gamma$ ,  $\vec{n}_\Gamma$  - радиус-вектор и внешняя нормаль точки границы. При прохождении электронов средних (порядка нескольких десятков keV) энергий через вещество основным механизмом энергетических потерь являются процессы возбуждения и ионизации атомов среды, а перераспределение электронов по направлениям движения осуществляется в основном за счет упругого рассеяния. Поэтому дифференциальное сечение можно приближенно представить в виде суммы дифференциального сечения упругого и неупругого рассеяния

$$\frac{d^2\sigma(E,\vec{\Omega},E',\vec{\Omega}')}{dE d\Omega} \approx \frac{d\sigma_{el}(E,\vec{\Omega},\vec{\Omega}')}{d\Omega} \cdot \delta(E-E') + \frac{d\sigma_{in}(E,E')}{dE} \delta(\vec{\Omega}-\vec{\Omega}') \quad (5)$$

В соответствии с этим и интеграл столкновений может быть разбит на упругую и неупругую части,  $\hat{I}(\Phi) = \hat{I}_{el}(\Phi) + \hat{I}_{in}(\Phi)$ , которые имеют вид.

$$\hat{I}_{el}(\Phi) = N \int_{4\pi} \frac{d\sigma_{el}(E,\vec{\Omega},\vec{\Omega}')}{d\Omega} \Phi(E,\vec{\Omega}') d\vec{\Omega}' - N \Sigma_{el}(E) \Phi(E,\vec{\Omega}) \quad (6)$$

$$\hat{I}_{in}(\Phi) = N \int_0^\infty \frac{d\sigma_{in}(E+Q,Q)}{dQ} \Phi(E+Q) dQ - N \Sigma_{in}(E) \Phi(E,\vec{\Omega}) \quad (7)$$

Дифференциальные сечения упругого и неупругого рассеяния имеют резкий пик в окрестности малых углов рассеяния и малых потерь энергии. Эти особенности позволяют выделить в интегралах столкновений малые параметры  $\beta$  и  $\varepsilon = J/E_0$  ( $J$  - средний потенциал ионизации,  $E_0$  - энергия налетающего электрона), характеризующие ширину пиков дифференциальных сечений и использовать для упрощения и анализа кинетического уравнения асимптотические методы.

Пикообразность дифференциальных сечений дает возможность упростить упругую и неупругую части интеграла столкновений, сводя их к дифференциальному оператору. Степенной характер убывания дифференциального сечения при удалении от пика приводит к необходимости использования метода последовательного разложения ядра и функции нагрузки [1\*] для отыскания корректного асимптотического разложения. Как показано в работе Гунько и Троппа [2\*], в результате применения этой методики к упругой части интеграла столкновений помимо обычного оператора Лапласа по угловым переменным возникает интегральный член, который может быть интерпретирован как оператор рассеяния на большие углы. Порядок этого члена оказался равным  $O((\ln(\beta))^{-1})$ . В параграфе 1.2 представлены результаты проведенного в [2] исследования собственных чисел упругой части интеграла столкновений, которое выявило структуру оператора рассеяния на большие

углы и позволило сравнить спектр интеграла столкновений со спектром аппроксимирующих его операторов. В качестве дифференциального сечения упругого рассеяния использовалось Резерфордское сечение. Поскольку сечение рассеяния зависит лишь от угла рассеяния, то собственными функциями являются сферические гармоники, а собственные числа выражаются через коэффициенты разложения сечения по полиномам Лежандра. В диссертации показано, что собственные числа  $\chi_l$  имеют разложение вида

$$\chi_l = N \Sigma_{el} \left( \beta^2 \ln \frac{\beta^2}{1 + \beta^2} \cdot l(l+1) + 2\beta^2 \cdot \frac{l(l+1)}{2} (2S_l + 1) + O(\beta^4 \ln \beta) \right), \quad S_l = \sum_{k=2}^l \frac{1}{k} \quad (8)$$

Учитывая, что собственные числа оператора Лапласа есть  $-l(l+1)$ , второй член разложения можно интерпретировать как собственные числа оператора рассеяния на большие углы. Показано, что спектр дифференциального оператора  $\Delta_{v,\varphi}$ , являющегося первым членом асимптотического разложения упругой части интеграла столкновений  $\hat{I}_{el}$  по  $\beta$ , значительно отличается от спектра  $\hat{I}_{el}$  даже для нескольких первых гармоник. Учет оператора рассеяния на большие углы существенно улучшает аппроксимацию спектра  $\hat{I}_{el}$  для малых номеров гармоник, однако асимптотическое поведение спектров  $\hat{I}_{el}$  и аппроксимирующих его операторов оказывается различным.

Дифференциальное сечение неупругого рассеяния тоже имеет пик в окрестности малых потерь энергии и убывает степенным образом при удалении от пика, поэтому для упрощения интеграла столкновений и в этом случае нужно использовать метод последовательного разложения ядра и функции нагрузки. Однако непосредственное использование этого метода оказывается невозможным, поскольку дифференциальное сечение зависит как от быстрой, так и от медленной переменной. В параграфе 1.3 проведено обобщение способа разложения интегралов с пикообразным ядром, убывающим степенным образом, на случай зависимости ядра от быстрой и медленной переменных. Этот результат опубликован в [3]. Использование такого обобщения позволяет получить разложение для неупругой части интеграла столкновений в виде

$$\hat{I}_{in}(\Phi) = \frac{\partial}{\partial E} \left( \frac{\Phi(E)}{E} \right) - \frac{1}{2 \ln \frac{\varepsilon}{1.166}} \left[ 2 \frac{\partial}{\partial E} \left( \frac{\Phi(E)}{E} \ln E \right) + \int_0^E \left( \frac{\Phi(E+Q)}{E+Q} - \frac{\Phi(E)}{E} - \frac{\partial}{\partial E} \left( \frac{\Phi(E)}{E} \right) Q \right) \cdot Q^{-2} dQ + \int_E^\infty \frac{\Phi(E+Q)}{(E+Q)Q^2} dQ - \frac{\Phi(E)}{E^2} \right] + O(\varepsilon) \quad (9)$$

Первый член полученного разложения совпадает с обычно используемым приближением непрерывных потерь. Следующий член разложения содержит интегральный оператор, который можно интерпретировать как оператор рассеяния с большими потерями энергии. Для всего разложения выполняется закон сохранения числа частиц.

Особенности процесса взаимодействия электронов с веществом, заключающиеся в преимущественном рассеянии вперед с малыми потерями энергии, приводят к тому, что длины свободного пробега по упругим и

неупругим столкновениям  $l_{el}$ ,  $l_{in}$  не характеризуют процессы угловой и энергетической релаксации в целом. Характерными длинами этих процессов являются длина изотропизации  $\lambda$  (транспортная длина пробега по импульсу) и полный пробег электрона в веществе  $s$ .

Как и в кинетической теории газов, в задачах кинетики электронов возможен переход от кинетического уравнения к уравнениям сплошной среды в области глубин  $z \gg \lambda(E)$ ,  $z \gg s(E)$ . Поскольку интеграл столкновений линейного кинетического уравнения сохраняет лишь число частиц, то из пяти уравнений сплошной среды остается лишь одно. В области глубин  $l_{el}(E) \ll z \sim \lambda(E)$ ,  $l_{in}(E) \ll z \sim s(E)$  также возможно некоторое упрощение кинетического уравнения, поскольку интеграл столкновения может быть заменен дифференциальным приближением. В итоге вся область разбивается на несколько слоев: собственно кинетический, в котором эволюция функции распределения описывается кинетическим уравнением; слой, где может быть использовано дифференциальное приближение; область, в которой полное описание дается уравнением диффузии. Несмотря на упрощение, уравнение во втором слое остается достаточно сложным. Однако для электронов с энергиями несколько десятков кэВ, распространяющихся в тяжелых мишенях, возможно существенное упрощение задачи. В этом случае характерные длины выстраиваются в цепочку  $l_{el} \ll l_{in} \ll \lambda \ll s$ . Тот факт, что  $\lambda \ll s$ , позволяет разделить процессы угловой и энергетической релаксации. Процесс релаксации электронов почти на всей глубине, кроме узкого приповерхностного слоя, может быть описан как диффузия в координатном пространстве, сопровождающаяся потерей энергии, а в приповерхностном слое можно воспользоваться приближением, в котором энергия считается почти постоянной. Такое разделение релаксационных процессов проводится в параграфе 1.4. Для его реализации кинетическое уравнение записывается в безразмерных переменных с использованием величины  $\sqrt{\lambda(E) \cdot s(E)}$  в качестве масштаба длины. Кинетическое уравнение при этом принимает вид

$$\delta \cdot \vec{\Omega} \cdot \nabla_{\vec{r}} \Phi = \lambda(E_0) \hat{I}_{el} \Phi + \delta^2 s(E_0) \hat{I}_{in} \Phi, \quad (10)$$

где  $\delta = \sqrt{\lambda(E_0)/s(E_0)}$ . В образцах с большим атомным номером параметр  $\delta$  мал, а интегралы столкновений  $\lambda(E_0) \hat{I}_{el} \Phi$ ,  $s(E_0) \hat{I}_{in} \Phi$  являются величинами порядка единицы. Таким образом, при производных по пространственным переменным появляется малый параметр, что позволяет отнести задачу переноса электронов к классу сингулярно возмущенных задач. Для корректного перехода от полной модели к сокращенному описанию с помощью уравнений меньшей размерности необходимо воспользоваться общей схемой асимптотического расщепления многомасштабных задач [3\*]. Согласно этой схеме процесс отыскания асимптотического разложения решения многомасштабных задач может быть разбит на два итерационных процесса – основной итерационный процесс и нахождение погранслойных функций. В ходе основного итерационного процесса формулируются уравнения меньшей размерности, являющиеся условием разрешимости задач для коэффициентов

асимптотического разложения решения по параметру малости задачи. Отыскание решений уравнений меньшей размерности позволяет найти и коэффициенты асимптотического разложения. Полученное в результате проведения основного итерационного процесса решение, вообще говоря, не удовлетворяет граничным условиям. В связи с этим оно должно быть дополнено погранслойными функциями, которые находятся во втором итерационном процессе. Сращивание внешнего и внутреннего разложений определяет граничные условия, необходимые для решения уравнений меньшей размерности.

В основном итерационном процессе решение ищется в виде ряда

$$\Phi = \sum_{k=0}^{\infty} \Phi_k(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) \cdot \delta^k \quad (11)$$

Подставляя этот ряд в кинетическое уравнение, получим цепочку уравнений для коэффициентов  $\Phi_k(\vec{r}, \vec{\Omega}, E)$ :

$$\begin{aligned} \lambda(E_0) \hat{I}_{el} \Phi_0 &= 0 \\ \lambda(E_0) \hat{I}_{el} \Phi_1 &= \vec{\Omega} \cdot \nabla_{\vec{r}} \Phi_0 \\ \lambda(E_0) \hat{I}_{el} \Phi_2 &= \vec{\Omega} \cdot \nabla_{\vec{r}} \Phi_1 - s(E_0) \hat{I}_m \Phi_0 \\ &\dots \end{aligned} \quad (12)$$

Если дифференциальное сечение упругого рассеяния зависит лишь от угла рассеяния, то собственными функциями оператора  $\lambda(E_0) \hat{I}_{el}$  являются сферические гармоники  $Y_{l,m}^i(\vec{\Omega})$ , а собственные числа  $\nu_l(E)$  определяются коэффициентами разложения дифференциального сечения упругого рассеяния по полиномам Лежандра. Собственному числу  $\nu_0 = 0$  соответствует единственная собственная функция  $Y_{00}^0(\vec{\Omega}) = 1$ , поэтому решением первого уравнения цепочки (12) будет  $\Phi_0(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) = U_0(\vec{r}, E)$ . Легко видеть, что правая часть второго уравнения цепочки является линейной комбинацией собственных функций, относящихся к собственному числу  $\nu_1(E)$ , и поэтому разрешима всегда. Его решение определено с точностью до изотропной функции  $U_1(\vec{r}, E)$ . Третье и последующие уравнения цепочки разрешимы не всегда. Условием их разрешимости является ортогональность правой части к собственной функции однородного сопряженного уравнения. При этом решение  $\Phi_k$  каждого уравнения цепочки определено с точностью до изотропной функции  $U_k(\vec{r}, E)$  и имеет вид

$$\Phi_k(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) = U_k + \frac{1}{\nu_1(E)} \vec{\Omega} \cdot \nabla_{\vec{r}} U_{k-1} + \sum_{l=1}^k \sum_{m=0}^l \sum_{i=0}^1 Y_{l,m}^i(\vec{\Omega}) F_{i,l,m}^k(U_0, \dots, U_{k-2}) \quad (13)$$

Таким образом, задача определения функции  $\Phi_k(\vec{r}, \vec{\Omega}, E)$  с помощью представления (13) сводится к задаче для  $U_k(\vec{r}, E)$ , зависящей лишь от пространственных переменных и энергии. Уравнение для  $U_k(\vec{r}, E)$  следует из условия разрешимости для  $\Phi_{k+2}(\vec{r}, \vec{\Omega}, E)$  и имеет следующий вид

$$(3\nu_1(E))^{-1} \Delta U_k - s(E_0) \hat{I}_m U_k = -D_{0,0,0}^k(U_0, \dots, U_{k-1}), \quad (14)$$

где  $D_{0,0,0}^k(U_0, \dots, U_{k-1})$  известные функции.

Для получения равномерно пригодного асимптотического разложения рассматриваются погранслойные функции, удовлетворяющие граничным условиям и выходящие на решение в основной области при удалении от границы. При этом в качестве масштаба глубины, измеряемой по нормали к плоскости границы, выбирается величина  $\lambda(E_0)$ . Решение и в этом случае ищется в виде ряда по малому параметру  $\delta$ ,  $v = \sum_{k=0}^{\infty} v_k \delta^k$ . Решение в пограничном слое рассматривается в предположении, что граница области является плоской, а граничное условие не зависит от точки поверхности. Функции  $v_k$  при этом зависят от погранслойной пространственной переменной  $\xi = z/\delta$ , переменной  $\mu = \cos\theta$ , где  $\theta$  полярный угол, отсчитываемый от оси  $z$ , и азимутального угла  $\varphi$ . Подстановка этого ряда в кинетическое уравнение приводит к цепочке задач для  $v_k$ , причем задачи для  $v_0, v_1$  являются однородными, в то время как функции  $v_k, k \geq 2$  оказываются решениями неоднородных задач с источниками членами, зависящими от  $v_{k-2}$ . Таким образом, задача построения погранслойного решения сводится к решению цепочки односкоростных задач. Источник в этих задачах параметрически зависит от энергии. Сращивание внешнего и внутреннего разложения определяет граничные условия, необходимые для решения уравнений меньшей размерности.

**Глава 2** посвящена исследованию пограничного слоя. Для реализации процедуры сращивания асимптотического разложения решения в пограничном слое и в области диффузии необходимо прежде всего исследовать поведение погранслойных функций  $v_k$  вдали от границ. Такое исследование проводится в параграфе 2.1, где координатная асимптотика погранслойных функций в слое эффективной изотропизации отыскивается по аналогии с алгоритмом, предложенным в [4\*]. Показано, что асимптотика решения однородного кинетического уравнения в пограничном слое имеет вид линейной комбинации собственной и присоединенной функций, соответствующих задаче  $\lambda(E_0)\widehat{I}_{el}g = \alpha\mu \cdot g$  при  $\alpha = 0$ , т.е.

$$v_0(\xi, \mu, E) = C_0(E) + B_0(E) \left( \xi + \frac{\mu}{v_1(E)} \right) + O(e^{-\alpha\xi}), \quad \xi \rightarrow \infty \quad (15)$$

На основе полученных результатов в параграфе 2.2 проводится сращивание решений в области диффузии и в пограничном слое, что позволяет определить недостающие граничные условия для уравнений меньшей размерности и условия на бесконечности для погранслойных функций и замкнуть алгоритм отыскания последовательных приближений. Эти условия выглядят следующим образом

$$\begin{aligned} C_0(E) &= U_0(0, E), \quad B_0(E) = 0 \\ C_k(E) &= U_k(0, E), \quad B_k(E) = \left. \frac{\partial U_{k-1}(z, E)}{\partial z} \right|_{z=0}, \quad k = 1, 2, 3, \dots \end{aligned} \quad (16)$$

В параграфе 2.3 проведено рассмотрение структуры решения задачи о взаимодействии мононаправленного моноэнергетического пучка электронов с твердотельной мишенью. Показано, что в соответствии с цепочкой длин  $l_{el} \ll l_{in} \ll \lambda \ll s$  в структуре решения имеются пограничные слои, в которых происходит перераспределение электронов по углам и энергиям в различных масштабах. В каждом из пограничных слоев выделены параметры малости и проведено упрощение кинетического уравнения. Указаны масштабы длин, углов и энергий, в которых кинетическое уравнение имеет универсальный вид. Сформулированы условия сращивания решения в смежных пограничных слоях. В некоторых слоях для первых членов разложения по малым параметрам приведено решение возникающих задач.

Результаты исследований, представленные в главах 1, 2 опубликованы в работах [4, 5, 8].

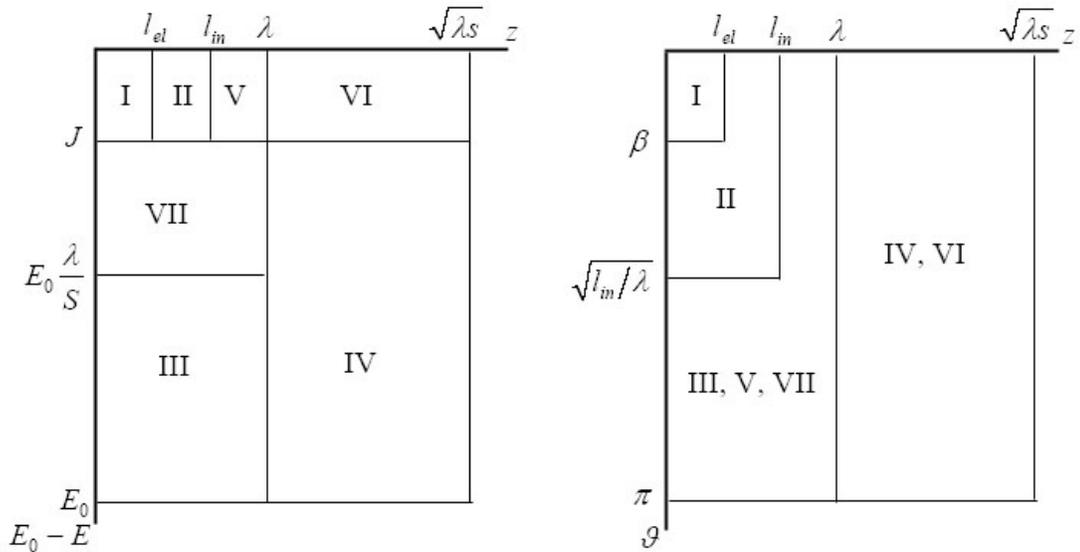


Рисунок 1. Схема пограничных слоев, возникающих в задаче о взаимодействии мононаправленного моноэнергетического пучка электронов с полубесконечной тяжелой мишенью: I – малоугловой упругий пограничный слой; II – малоугловой неупругий пограничный слой; III – пограничный слой эффективной изотропизации; IV – область диффузии; V-VI – неупругий столкновительный пограничный слой; VII – пограничный слой угловой и энергетической релаксации

В главе 3 рассмотрены аналитические результаты, полученные при решении некоторых задач теории переноса электронов средних энергий в диффузионном приближении. Параграф 3.1 посвящен расчету распределения электронов в мишени, облучаемой моноэнергетическим пучком по нормали к поверхности. На основе разработанной в главе 1 схемы асимптотического расщепления кинетического уравнения отыскание функции распределения электронов сводится к решению уравнения меньшей размерности в области диффузии. При этом функция распределения в нулевом приближении выражается через решения одномерного обобщенного однородного уравнения диффузии. Для приближенного аналитического решения этого уравнения используется дифференциальное приближение для неупругой части интеграла

столкновений. Граничные условия для уравнения диффузии при  $z=0$  представляют собой условия первого рода. Функция распределения, полученная из решения уравнения диффузии, имеет вид

$$\Phi(z, \mu, E) = \frac{\bar{Q}(E_0) C_0(E_0)}{\bar{Q}(E \cdot E_0) 3|v_1(E_0)|} \cdot \frac{z}{2\sqrt{\pi}\tau^{3/2}} \exp\left(-\frac{z^2}{4\tau}\right), \quad \tau = \int_1^E \frac{\bar{Q}(E_0)dE}{3\bar{Q}(E \cdot E_0) \cdot v_1(E)} \quad (17)$$

Здесь  $\bar{Q}(E_0)$  - средние потери энергии в акте неупругого рассеяния,  $C_0(E_0)$  - константа, определяемая соотношением (16). Функция (17) имеет особенность в окрестности  $z=0$ . Для ее устранения необходимо провести сращивание полученного решения с решением в пограничном слое. Отметим, что погрешность в полученном распределении электронов достаточно велика. Это связано как с достаточно большим значением параметра  $\delta$ , так и с неприменимостью диффузионного приближения в пограничном слое.

В параграфе 3.2 проведен расчет функции выхода электронов  $q(z, E)$  (т.е. вероятности того, что электрон, рожденный на глубине  $z$  с энергией  $E$ , выйдет из образца) с энергиями в диапазоне 0.5-30keV из полубесконечной однородной мишени в диффузионном приближении. Эта задача оказывается актуальной для теоретического описания процесса эмиссии электронов из образцов, облучаемых рентгеновским излучением. Показано, что функция выхода в диффузионном приближении имеет вид

$$q(z_0, E_0) = 1 - \text{erf}(z_0/L(E_0)), \quad L(E_0) = 2\sqrt{\lambda(E_0)s(E_0)\tau^*}, \quad \tau^* = \int_1^0 \frac{\bar{Q}(E_0)dE}{3v_1(E \cdot E_0)\bar{Q}(E \cdot E_0)} \quad (18)$$

В этом же параграфе проведено сравнение расчетов эмиссии электронов с результатами эксперимента, проведенного в [5\*]. В этой работе определялась зависимость доли электронов, вышедших из слоя,  $K(t)$ , от толщины слоя  $t$  при облучении образца рентгеном. Рассчитанная с использованием (18) зависимость  $K(t)$  хорошо согласуется с экспериментом. В то же время, вычисление  $K(t)$  с помощью полуэмпирической формулы [6\*]

$$q(z) = 0.5(1 - z/L'), \quad L' = 6 \cdot 10^{-6} \cdot A \cdot E^{1.4} / \rho Z \quad (19)$$

дает сильно заниженные значения.

Параграф 3.3 посвящен расчету функции выхода электронов из образцов типа слой на подложке. Кинетическое уравнение в диффузионном приближении в такой задаче сводится к уравнению с кусочно-непрерывными коэффициентами. Слабая зависимость отношения средних потерь энергии в слое к средним потерям в подложке от энергии электрона позволяет свести рассматриваемое уравнение к уравнению теплопроводности с кусочно-постоянными коэффициентами.

Развитый в главах 1, 2 асимптотический подход к исследованию кинетического уравнения для электронов позволяет провести полный качественный анализ решения, однако значения малых параметров оказываются не настолько малыми, чтобы найти распределение электронов с точностью, достаточной для решения обратных задач. В связи с этим в главах 4-7 разрабатывается численный метод решения кинетического уравнения при сильных отклонениях ФР от равновесия, основанный на разложении по

сферическим гармоникам. При этом рассматривается более общая задача решения нелинейного уравнения Больцмана.

Нелинейное уравнение Больцмана имеет вид

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \vec{v} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{r}}\right) n_0(\vec{r}, t) f(\vec{v}, \vec{r}, t) = n_0^2 \hat{I}(f, f) \quad (20)$$

Здесь  $f(\vec{v}, \vec{r}, t)$  - нормированная на единицу функция распределения по скоростям, зависящая от скорости  $\vec{v}$ , положения частицы  $\vec{r}$  и времени  $t$ , а  $n_0$  - плотность частиц. Интеграл столкновений  $\hat{I}(f, f)$  представляется в форме

$$\hat{I}(f, f) = \int (f(\vec{v}_1) f(\vec{v}_2) - f(\vec{v}) f(\vec{v}')) g \sigma(g, \theta) d\vec{v}' d\vec{k}. \quad (21)$$

Здесь  $\vec{v}$ ,  $\vec{v}'$ ,  $\vec{v}_1$ ,  $\vec{v}_2$  - скорости сталкивающихся частиц до и после взаимодействия,  $\vec{v}_1 = (\vec{v} + \vec{v}' + \vec{k}g)/2$ ,  $\vec{v}_2 = (\vec{v} + \vec{v}' - \vec{k}g)/2$ ,  $\vec{g} = \vec{v} - \vec{v}'$  - вектор относительной скорости,  $\vec{k}$  - единичный вектор, направленный вдоль вектора относительной скорости частиц после столкновения. Угол рассеяния  $\theta$  определяется соотношением  $\cos \theta = \vec{k} \cdot \vec{g} / |\vec{g}|$ . Величина  $\sigma(g, \theta)$  представляет собой дифференциальное сечение рассеяния.

**Глава 4** посвящена формулировке основных положений моментного метода и метода разложения по сферическим гармоникам. В параграфе 4.1 представлен краткий обзор последних результатов в развитии моментного метода решения уравнения Больцмана, который в последние годы получил значительный импульс. В этом методе ФР раскладывается по базисным функциям, представляющим собой произведение полиномов Сонина  $S_{l+1/2}^r(c^2)$  на сферические гармоники,

$$H_{i,r,l,m}(\vec{c}) = S_{l+1/2}^r(c^2) c^l Y_{lm}^i(\theta, \varphi). \quad (20)$$

Разложение ФР имеет вид

$$f(\vec{v}, \vec{r}, t) = M(v, T) \sum_j C_j(\vec{r}, t) H_j(\vec{v} \sqrt{m/(2kT)}), \quad M(v, T) = (m/2kT)^{3/2} \exp(-mv^2/2kT), \quad (21)$$

где  $m$  - масса частицы,  $T$  - температура максвеллиана  $M(v, T)$ , возле которого проводится разложение. Уравнение Больцмана заменяется при этом на уравнения для коэффициентов разложения  $C_j(\vec{r}, t)$ , а интеграл столкновений переходит в двойную сумму, коэффициентами которой являются матричные элементы (МЭ) интеграла столкновений

$$K_{j_1, j_2}^j = \int H_{j_1}(\vec{v} \sqrt{m/(2kT)}) \hat{I}(M_{j_1}, M_{j_2}) d\vec{v} / g_{j_1}, \quad g_j = \int M(c) H_j^2 d\vec{c}, \quad (22)$$

$$M(c) = \left(\frac{1}{\pi}\right)^{3/2} \exp(-c^2)$$

Основную трудность в реализации моментного метода представляет расчет МЭ. В работе [7\*] было предложено рассчитывать МЭ на основе рекуррентных соотношений. Эти соотношения являются следствием инвариантности интеграла столкновений относительно выбора базисных функций и выполняются для любого потенциала взаимодействий. Другая трудность заключается в том, что разложение (21) сходится лишь при выполнении критерия сходимости

$$\int (M(v, T))^{-1} f^2(\vec{v}) d^3v < \infty. \quad (23)$$

Ограничения на ФР, связанные с этим критерием, возникают при разложении по полиномам Сонина. От них можно избавиться, если рассматривать разложение ФР только по сферическим гармоникам.

В параграфе 4.2 вводится понятие ядер нелинейного интеграла столкновений, возникающих при использовании метода разложения по сферическим гармоникам. Интеграл столкновений представляется в виде

$$\hat{I}(f, f) = \int G(\vec{v}, \vec{v}_1, \vec{v}_2) f(\vec{v}_1) f(\vec{v}_2) d\vec{v}_1 d\vec{v}_2, \quad (24)$$

где  $G(\vec{v}, \vec{v}_1, \vec{v}_2)$  - ядро интеграла столкновений, зависящее от векторных скоростей. Рассматривая ФР в системе отсчета, движущейся со скоростью  $\vec{u} = u\vec{e}_z$  вдоль оси  $\vec{e}_z$  и выбирая в качестве единицы скорости некоторую тепловую скорость  $v_T = \sqrt{2kT/m}$ , соответствующую температуре  $T$ , можно определить безразмерную относительную скорость

$$\vec{c} = (\vec{v} - u\vec{e}_z)/v_T. \quad (25)$$

Без потери общности дальнейшее рассмотрение проводится в осесимметричном случае. Сферические гармоники при этом переходят в полиномы Лежандра и разложение ФР имеет вид

$$f(\vec{c}) = \sum_l f_l(c) P_l(x), \quad x = \cos \theta \quad (26)$$

Коэффициенты разложения  $f_l(c)$  зависят лишь от модуля скорости  $c$ ,  $\theta$  - угол между осью  $\vec{e}_z$  и направлением скорости  $\vec{c}$ . Подстановка (26) в (24) и разложение интеграла столкновений по полиномам Лежандра дает

$$\hat{I}(f, f) = \sum_{l, l_1, l_2} P_l(x) \left( \int_0^\infty \int_0^\infty G_{l, l_1, l_2}^l(c, c_1, c_2) f_{l_1}^a(c_1) f_{l_2}^b(c_2) c_1^2 c_2^2 dc_1 dc_2 \right) \quad (27)$$

Здесь  $G_{l, l_1, l_2}^l(c, c_1, c_2)$  - ядра интеграла столкновений, зависящие от модулей скоростей. Они следующим образом связаны с ядром, зависящим от векторных скоростей, и с МЭ интеграла столкновений

$$G_{l, l_1, l_2}^l(c, c_1, c_2) = 4\pi \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \frac{P_l(\cos \theta)}{\|P_l\|^2} G(\vec{c}, \vec{c}_1, \vec{c}_2) P_{l_1}(\cos \theta_1) P_{l_2}(\cos \theta_2) d \cos \theta d \cos \theta_1 d \cos \theta_2 \quad (28)$$

$$G_{l, l_1, l_2}^l(c, c_1, c_2) = M(c) \sum_r \sum_{n_1} \sum_{n_2} \frac{c^l c_1^{l_1} c_2^{l_2}}{\sigma_{n_1} \sigma_{n_2}} S_{l+1/2}^r(c^2) K_{r, l_1, r_2}^{n_1} S_{l_1+1/2}^{n_1}(c_1^2) S_{l_2+1/2}^{n_2}(c_2^2) \quad (29)$$

Таким образом, разложение по сферическим гармоникам приводит к замене 6-ти кратного интеграла столкновений набором интегральных операторов, ядра которых зависят только от модулей скорости и играют ту же роль, что и МЭ в обычном моментном методе. Эти ядра и являются предметом дальнейшего рассмотрения.

При рассмотрении задачи о релаксации малой примеси на фоне с известным распределением интеграл столкновений оказывается линейным оператором. Если фон имеет равновесное распределение, то ядро этого линейного оператора связано с ядром нелинейного оператора соотношением

$$L(\vec{c}, \vec{c}_1) = \int G(\vec{c}, \vec{c}_1, \vec{c}_2) M(c_2) d\vec{c}_2 \quad (30)$$

Разложение ядер линейного интеграла столкновений по полиномам Лежандра имеет вид

$$L(\bar{c}, \bar{c}_1) = \sum_l \frac{2l+1}{2\pi} L_l(c, c_1) P_l\left(\frac{(\bar{c}, \bar{c}_1)}{c \cdot c_1}\right), \quad L_l(c, c_1) = M(c) \sum_{r=0}^{\infty} \sum_{\tau_1=0}^{\infty} c^l S_{l+1/2}^r(c^2) K_{r_1, 0}^{\tau_1} \frac{c_1^l S_{l+1/2}^{\tau_1}(c_1^2)}{\sigma_{r_1 l}} \quad (31)$$

В параграфе 4.2 приводятся аналитические выражения для ядер линейного интеграла столкновений  $L_l(c, c_1)$ , полученные в работах [8\*, 9\*] для случаев твердых шаров и псевдомаксвелловских молекул. Отметим, что если линейные ядра интеграла столкновений для случая твердых шаров были впервые рассмотрены в работах [10\*, 8\*], то ядра нелинейного интеграла столкновений были впервые введены и исследованы в наших работах [31, 32, 33, 35, 36, 37].

Формула (31) позволяет строить ядра  $L_l(c, c_1)$  для любого потенциала взаимодействия, если известны соответствующие МЭ. Однако при некоторых аргументах ряд (31) сходится плохо, и при непосредственном суммировании оказывается необходимым учитывать очень большое число членов ряда. Эту трудность можно обойти, если найти асимптотику остатка ряда и добавить ее к конечной сумме. При этом требуется информация об асимптотическом поведении МЭ при больших значениях индексов.

В главе 5 рассматривается асимптотика МЭ и построение ядер линейного интеграла столкновений для некоторых моделей взаимодействия. В параграфе 5.1 найдено выражение для линейных МЭ в случае псевдостепенных потенциалов взаимодействия, не содержащее суммирования. На основе этого выражения строится асимптотика линейных МЭ  $K_{0n}^r$  с индексами, стремящимися к бесконечности так, что разность между ними остается фиксированной. Получена также асимптотика МЭ  $K_{0n}^r$  в случае, когда один из индексов стремится к бесконечности, а второй фиксирован. Использование рекуррентных соотношений позволяет построить асимптотику нелинейных МЭ  $K_{p,n}^r$  при фиксированном  $p$  и больших значениях индексов  $r, n$ . Аналогичный прием дает асимптотику нелинейных МЭ в том случае, когда два индекса фиксированы. В случае максвелловских молекул получена также асимптотика МЭ по трем индексам. Изложенные в параграфе 5.1 результаты опубликованы в работе [19]. В параграфе 5.2 найдена асимптотика остатка ряда для ядра  $L_0(c, c_1)$  линейного интеграла столкновений в случае максвелловских молекул. При этом использована формула Эйлера-Маклорена и развит предложенный в [11\*] метод получения асимптотики полиномов Сонина. Этот результат опубликован в [24]. В параграфе 5.3 изложены результаты работы [27], где асимптотика остатка ряда для ядра  $L_0(c, c_1)$  линейного интеграла столкновений найдена также и для случая твердых шаров. Показано, что использование асимптотики остатка ряда позволяет рассчитывать ядра линейного интеграла столкновений с высокой точностью при использовании лишь нескольких десятков МЭ.

Глава 6 посвящена рассмотрению свойств ядер нелинейного интеграла столкновений. В параграфе 6.1 получено аналитическое выражение для ядра  $G(\bar{v}, \bar{v}_1, \bar{v}_2)$  нелинейного интеграла столкновений, зависящего от векторных скоростей. Это ядро может быть представлено в виде разности

$$G(\vec{v}, \vec{v}_1, \vec{v}_2) = G^+(\vec{v}, \vec{v}_1, \vec{v}_2) - G^-(\vec{v}, \vec{v}_1, \vec{v}_2) \quad (32)$$

где  $G^+(\vec{v}, \vec{v}_1, \vec{v}_2)$ ,  $G^-(\vec{v}, \vec{v}_1, \vec{v}_2)$  - ядра интегралов обратных и прямых столкновений, которые имеют вид

$$G^-(\vec{v}, \vec{v}_1, \vec{v}_2) = \delta(\vec{v}_1 - \vec{v}) |\vec{v} - \vec{v}_2| \Sigma(|\vec{v} - \vec{v}_2|) \quad (33)$$

$$G^+(\vec{v}, \vec{v}_1, \vec{v}_2) = 8\sigma \left( |\vec{v}_1 - \vec{v}_2|, \arccos \left( \frac{((\vec{v}_1 - \vec{v}_2)(2\vec{v} - \vec{v}_1 - \vec{v}_2))}{|\vec{v}_1 - \vec{v}_2| |2\vec{v} - \vec{v}_1 - \vec{v}_2|} \right) \right) \frac{\delta(|\vec{v}_1 - \vec{v}_2| - |2\vec{v} - \vec{v}_1 - \vec{v}_2|)}{|\vec{v}_1 - \vec{v}_2|} \quad (34)$$

В случае степенных потенциалов ядро оказывается однородной функцией своих аргументов. Степень однородности при этом определяется показателем степени в зависимости потенциала взаимодействия от расстояния. Это свойство мы будем называть свойством подобия. Вследствие подобия ядра нелинейного интеграла столкновений  $G_{l_1, l_2}^l(c, c_1, c_2)$ , зависящие от модулей скоростей, могут быть представлены в виде произведения функции, зависящей от двух переменных, на степень от суммы квадратов модулей скоростей. Построение функции, зависящей от двух переменных, позволяет найти ядро для любых, сколь угодно больших модулей скоростей. Интегрирование ядра нелинейного интеграла столкновений с максвеллианом решает проблему построения линейного ядра в области больших скоростей.

В этой же главе рассмотрены свойства ядер интеграла прямых столкновений  $G^-(\vec{v}, \vec{v}_1, \vec{v}_2)$ . Показано, что это  $G^-(\vec{v}, \vec{v}_1, \vec{v}_2)$  выражается через ядро некоторого линейного оператора, обладающего свойством ортогональной инвариантности. Ядра интеграла прямых столкновений,  $G_{l_1, l_2}^{-l}(c, c_1, c_2)$ , зависящие от модулей скорости, выражаются через полное сечение с помощью одной квадратуры, и их построение не вызывает особых затруднений. В параграфе 6.3 на основе инвариантности интеграла столкновений относительно выбора скорости системы отсчета получены связи между ядрами нелинейного интеграла столкновений, которые имеют вид

$$\hat{B}_l^{(1)}(c)G_{l_1, l_2}^{l-1}(c, c_1, c_2) + \hat{B}_l^{(2)}(c)G_{l_1, l_2}^{l+1}(c, c_1, c_2) + \hat{B}_l^{(3)}(c_1)G_{l_1+1, l_2}^l(c, c_1, c_2) + \\ + \hat{B}_l^{(4)}(c_1)G_{l_1-1, l_2}^l(c, c_1, c_2) + \hat{B}_l^{(3)}(c_2)G_{l_1, l_2+1}^l(c, c_1, c_2) + \hat{B}_l^{(4)}(c_2)G_{l_1, l_2-1}^l(c, c_1, c_2) = 0 \quad (35)$$

Здесь

$$\hat{B}_l^{(1)}(c) = \frac{l}{2l-1} \left( \frac{\partial}{\partial c} - \frac{l-1}{c} \right), \quad \hat{B}_l^{(2)}(c) = \frac{l+1}{2l+3} \left( \frac{\partial}{\partial c} + \frac{l+2}{c} \right), \\ \hat{B}_l^{(3)}(c) = \frac{l+1}{2l+1} \left( \frac{\partial}{\partial c} + \frac{l+2}{c} \right), \quad \hat{B}_l^{(4)}(c) = \frac{l}{2l+1} \left( \frac{\partial}{\partial c} - \frac{l-1}{c} \right) \quad (36)$$

- линейные дифференциальные операторы первого порядка. Таким образом, связи между ядрами, в отличие от связей между МЭ, оказываются дифференциальными соотношениями. На основании найденных связей между ядрами удается построить рекуррентную процедуру их отыскания. Эта процедура позволяет последовательно находить наборы (слои) ядер  $G_{l_1, l_2}^l(c, c_1, c_2)$  с фиксированной суммой индексов  $l+l_1+l_2=2\lambda$  при  $\lambda=1,2,\dots$ . В каждом слое задача сводится к отысканию ядра с индексами  $l=l_1=\lambda$ ,  $l_2=0$ . Это ядро находится путем выполнения конечного числа дифференцирований и интегрирований известных функций. Остальные ядра на слое выражаются через

ядро  $G_{\lambda 0}^{\lambda}(c, c_1, c_2)$  и некоторые известные функции, и тоже могут быть получены выполнением конечного числа дифференцирований и интегрирований. Стартовым для такой процедуры является ядро  $G_{00}^0(c, c_1, c_2)$ .

В главе 7 предложен способ отыскания ядер  $G_{00}^{+0}(c, c_1, c_2)$  и выполнены первые два шага рекуррентной процедуры. В параграфе 7.1 показано, что вследствие соотношения (30) связь между ядром нелинейного интеграла столкновений  $G_{00}^{+0}(c, c_1, c_2)$  и ядром линейного интеграла столкновений  $L_0^+(c, c_1)$  можно рассматривать как преобразование Лапласа, и, следовательно, ядро  $G_{00}^{+0}(c, c_1, c_2)$  может быть найдено обратным преобразованием Лапласа. Переменная, по которой выполняется обратное преобразование Лапласа, обратно пропорциональна корню из температуры фона в линейной задаче. Если известна зависимость ядра линейного интеграла столкновений  $L_0^+(c, c_1)$  от температуры фона, то в некоторых случаях можно найти аналитическое выражение для ядра интеграла обратных столкновений  $G_{00}^{+0}(c, c_1, c_2)$ . Такое выражение удастся найти для случаев твердых шаров и псевдомаксвелловских молекул. Оказалось, что ядра  $G_{00}^{+0}(c, c_1, c_2)$  в этих случаях имеют одинаковую структуру. При фиксированном значении  $c$  вся область  $c_1 > 0, c_2 > 0$  разбивается на ряд подобластей, в которых ядра задаются различными формулами. Границами этих подобластей являются прямые  $c_1 = c, c_2 = c$  и дуга  $c_1^2 + c_2^2 = c^2$ . Определение этих подобластей представлено в таблице 1. На границах ядра непрерывны и имеют излом. В области  $c_1^2 + c_2^2 < c^2$  ядра обращаются в ноль, что является следствием закона сохранения энергии. Ядра симметричны относительно перестановки второго и третьего аргументов и удовлетворяют соотношению подобия. В таблице 2 представлены формулы для ядра для модели псевдомаксвелловских молекул в каждой из подобластей.

D1	D2	D3	D4
$c^2 \leq c_1^2 + c_2^2, c_1 < c, c_2 < c$	$c_1 < c, c_2 > c$	$c_1 > c, c_2 < c$	$c_1 > c, c_2 > c$

Таблица 1. Определение подобластей D1 – D4

	D1	D2	D3	D4
$G_{0,0}^{+0}$	$\frac{8\pi}{cc_1c_2} \operatorname{arctg} \left( \sqrt{\frac{c_1^2 + c_2^2 - c^2}{c^2}} \right)$	$\frac{8\pi}{cc_1c_2} \operatorname{arctg} \left( \sqrt{\frac{c_1^2}{c_2^2}} \right)$	$\frac{8\pi}{cc_1c_2} \operatorname{arctg} \left( \sqrt{\frac{c_2^2}{c_1^2}} \right)$	$\frac{4\pi^2}{cc_1c_2} \times$ $\left( 1 - \frac{2}{\pi} \operatorname{arctg} \left( \sqrt{\frac{c_1^2 + c_2^2 - c^2}{c^2}} \right) \right)$

Таблица 2. Ядро  $G_{0,0}^{+0}$  для модели псевдомаксвелловских молекул

В параграфе 7.2 выполнен первый шаг рекуррентной процедуры с использованием найденных выражений для  $G_{00}^{+0}(c, c_1, c_2)$  в качестве стартовых ядер. Показано, что полученные при этом ядра  $G_{10}^{+1}(c, c_1, c_2)$ ,  $G_{11}^{+0}(c, c_1, c_2)$ ,  $G_{01}^{+1}(c, c_1, c_2)$  удовлетворяют соотношению подобия и некоторым соотношениям, следующим из законов сохранения числа частиц, импульса и энергии. Приведены также выражения для ядер  $G_{l_1 l_2}^{+l}(c, c_1, c_2)$  в случае  $l + l_1 + l_2 = 4$ , полученные в результате выполнения второго шага рекуррентной процедуры. Изложенные в главах 6 и 7 результаты опубликованы в работах [35,36,37].

Получение аналитических выражений для ядер  $G_{0,0}^{+0}(c, c_1, c_2)$  с помощью обратного преобразования Лапласа возможно не всегда. Даже при наличии аналитического выражения для зависимости линейного ядра от температуры фона расчет  $G_{0,0}^{+0}(c, c_1, c_2)$  может потребовать численного обращения преобразования Лапласа. При отсутствии аналитической зависимости  $\bar{L}_0^+(c, c_1; \alpha)$  подход, основанный на использовании обратного преобразования Лапласа, и вовсе может оказаться неприменимым. В этой ситуации перспективным представляется прямой расчет  $G_{0,0}^{+0}(c, c_1, c_2)$  с помощью МЭ. Такой подход позволяет рассчитывать ядра для произвольного закона взаимодействия, если известны МЭ. Тем не менее, его использование сталкивается с определенными трудностями – при некоторых значениях аргументов для расчета суммы оказывается необходимым учитывать очень большое число членов. Подобные трудности возникали и при отыскании линейных ядер интеграла столкновений, расчет которых был рассмотрен в пятой главе. Там же был предложен способ учета остатка ряда, заключающийся в использовании асимптотики МЭ и полиномов Сонина при больших индексах и переходе от суммирования к интегрированию по формуле Эйлера-Маклорена. Такой подход позволил с высокой точностью рассчитывать линейное ядро при учете сравнительно небольшого числа членов конечной суммы. Применимость подобного подхода к расчету ядер нелинейного интеграла столкновений продемонстрирована на примере расчета ядра  $G_{0,0}^{+0}(c, c_1, c_2)$  для случая псевдомаксвелловских молекул. Наличие аналитического выражения для  $G_{0,0}^{+0}(c, c_1, c_2)$ , полученного в параграфе 7.1, обеспечивает возможность контроля точности полученных результатов.

Полученные в седьмой главе ядра прямых и обратных нелинейных интегралов столкновений позволяют рассмотреть одну из фундаментальных задач кинетической теории газов - задачу нелинейной релаксации сильно неравновесной по скоростям ФР к равновесному распределению. В параграфе 7.4 рассматривается несколько задач нелинейной релаксации для пространственно однородной изотропной по скоростям ФР. При этом используется два вида сечений взаимодействия – псевдомаксвелловские молекулы и твердые шары. Интегрирование по скоростям при вычислении интеграла столкновений осуществляется с помощью квадратурной формулы Гаусса-Кристоффеля. Для обеспечения гладкости подинтегральной функции в интеграле обратных столкновений целесообразно перейти к полярным

координатам на плоскости  $c_1, c_2$ . Кинетическое уравнение интегрируется методом Рунге-Кутты. В качестве первого примера рассмотрен процесс релаксации для псевдомаксвелловских молекул. Начальное условие представляет собой ВКВ-моду, т.е. ФР в начальный момент времени является линейной комбинацией нулевого и первого полиномов Сонина. Такая задача, как известно, имеет аналитическое решение [12\*]. Расчет производился для  $c = 0.1, 0.2, \dots, 12$  с шагом по времени  $\Delta t = 0.2$  до  $t = 80$ . Относительная ошибка в функции распределения по сравнению с аналитическим решением не превышает 0.0015 во всем рассматриваемом интервале скоростей от нуля до 10 тепловых скоростей.

Задача релаксации была решена также для модели твердых шаров. В качестве начального условия для ФР была использована та же ВКВ-мода, что и для псевдомаксвелловских молекул. Поскольку аналитическое решение задачи в этом случае отсутствует, то рассчитанные зависимости ФР сравнивались с результатами, полученными моментным методом в [7\*]. Это сравнение продемонстрировало полное совпадение зависимостей ФР от скорости во всем рассматриваемом диапазоне скоростей (до 14 тепловых скоростей) во все моменты времени.

В этом же параграфе решена задача релаксации для псевдомаксвелловских молекул в случае, когда в начальный момент ФР представляет собой линейную комбинацию двух максвеллианов с разными температурами  $T_1$  и  $T_2$ , причем  $T_1/T_2 = 0.1$ , а коэффициенты линейной комбинации равны  $2/3$  и  $1/3$ . В этой ситуации критерий сходимости (23) нарушается и стандартный моментный метод неприменим. Тем не менее, использование ядер для расчета интеграла столкновений позволяет и в этом случае рассчитать эволюцию ФР. Таким образом, можно утверждать, что метод, основанный на использовании ядер нелинейного интеграла столкновений, позволяет строить ФР с очень высокой точностью до скоростей порядка 10 тепловых скоростей как в ситуациях, когда стандартный моментный метод может быть использован, так и в ситуациях, где он неприменим.

В параграфе 7.5 рассмотрен метод разложения по сферическим гармоникам применительно к линейному уравнению Больцмана, описывающему перенос электронов средних энергий в веществе. Получено выражение для ядер интеграла столкновений в этом случае. Показано, что в случае односкоростной задачи расчет ядер сводится к вычислению коэффициентов разложения дифференциального сечения упругого рассеяния по полиномам Лежандра. В общем случае, в силу малости отношения  $l_{el}/l_m$ , ядра интеграла столкновений мало отличаются от ядер односкоростной задачи.

В этом же параграфе проводится численное решение задачи об угловой релаксации электронов в пограничном слое эффективной изотропизации. При этом используется метод дискретных ординат [13\*,14\*] и представление интеграла столкновений через ядра. Такое представление интеграла столкновений с помощью ядер впервые было использовано в задачах кинетики

Лойялкой [15\*]. В своих работах он использовал единственно известные на то время ядра – ядра линейного интеграла столкновений для модели твердых шаров. Решались стационарные граничные задачи, в частности, задача о диффузии газа в полупространстве на полностью поглощающую стенку. По замечанию Лойялки, такой подход впервые дал возможность с высокой точностью описать поведение ФР малой примеси на равновесном газе вблизи границы для модели твердых шаров.

Особенность решаемой задачи заключается в сильной пикообразности дифференциального сечения рассеяния электронов и связанной с этим необходимостью использования большого числа узлов в формуле Гаусса для интегрирования по углам при расчете интеграла столкновений. Кроме того,  $\delta$ -образный характер граничного условия, описывающего падение мононаправленного пучка на мишень заставляет выделять в решении нерассеянную и рассеянную части. При решении задачи для рассеянной части методом итераций с нулевым начальным приближением оказывается необходимым выполнить очень большое число итераций. Отмеченные особенности привели к необходимости модификации стандартного  $S_N$  метода. Выгодным оказалось использование уравнения переноса в интегральной форме и использование малоуглового приближения в качестве начального приближения для отыскания рассеянной части решения. С помощью

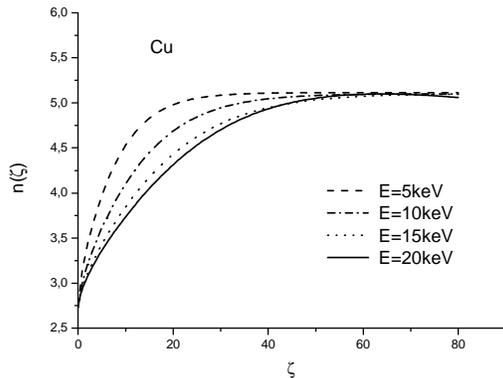


Рисунок 2. Зависимость концентрации электронов в пограничном слое эффективной изотропизации от глубины в нулевом приближении по малому параметру  $\delta = \sqrt{\lambda(E)/s(E)}$  в мишени из Cu. Глубины измеряются в длинах свободного пробега по упругим столкновениям  $l_{el}(E)$ . Энергии налетающего пучка электронов  $E = 5, 10, 15, 20$  кэВ.

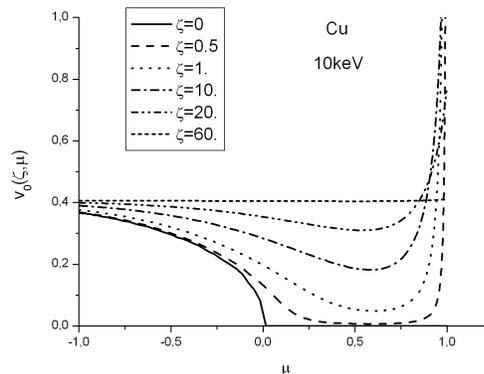


Рисунок 3. Угловые зависимости  $v_0(\xi, \mu)$  в Cu при начальной энергии пучка  $E = 10$  кэВ на глубинах  $\zeta = 0, 0.5, 1., 10., 20., 60$ . Глубины измеряются в длинах свободного пробега по упругим столкновениям  $l_{el}(E)$ .

разработанного алгоритма решены задачи отыскания дифференциальной плотности потока электронов в пограничном слое эффективной изотропизации для Al, Cu, Au при начальных энергиях пучка 5, 10, 15 и 20 кэВ. В качестве дифференциального сечения упругого рассеяния использовалось сечение

Мотта. Как показали расчеты, предельное значение дифференциальной плотности потока на больших глубинах практически не зависит от атомного номера мишени и энергии пучка.

Рассмотренный в главах 1 - 3 асимптотический подход к решению кинетического уравнения для электронов и аналитические решения, полученные на его основе, позволяют выявить характер зависимости распределения электронов от основных параметров задачи. Развитый численный метод решения дает возможность принять во внимание особенности взаимодействия электронов с веществом и получить детальную информацию о распределении электронов. Тем не менее, в ряде случаев для учета сложной геометрии мишени и различных способов регистрации сигнала оказывается удобным использовать метод прямого моделирования транспорта электронов – метод Монте-Карло. В рамках этого метода удается особенно просто учитывать неоднородность мишени, наличие включений, тонкую структуру дифференциальных сечений рассеяния электронов и т.д.

При реализации моделирования транспорта электронов по методу Монте-Карло наибольшие трудности представляет расчет взаимодействия электронов с веществом. В **главе 8** рассмотрены методы расчета дифференциальных сечений упругого и неупругого рассеяния. На их основе были вычислены дифференциальные сечения упругого рассеяния по формуле Мотта в широком диапазоне энергий налетающего электрона (от 5 эВ до 30 кэВ) для атомов с атомными номерами от 1 до 103. В том же диапазоне энергий рассчитаны дифференциальные сечения неупругого рассеяния для ряда веществ. Детали этого расчета приведены в [15]. Все эти данные помещены в архив [www.ioffe.ru/ES/](http://www.ioffe.ru/ES/). В параграфе 8.3 приведен обзор принципов, моделей и процедур, используемых для моделирования транспорта электронов по методу Монте-Карло. Там же описаны особенности программных пакетов, разработанных для моделирования процессов взаимодействия электронного пучка с мишенью и электронной фотоэмиссии, возникающей при облучении образца рентгеновским излучением, а также для расчета функции выхода электронов. Все пакеты построены по модульному принципу, что позволяет легко модифицировать программу и проводить расчеты по различным моделям, учитывать разные процессы, разные способы описания дифференциальных сечений и т.д.

В параграфе 8.4 полученные при моделировании результаты сравниваются с экспериментальными данными и результатами других авторов.

**Глава 9** иллюстрирует применение разработанных в предыдущих главах аналитических и численных методов к решению самых разнообразных проблем, связанных с транспортом электронов. В параграфе 9.1 проведено сравнение результатов аналитической и численной аппроксимации функции выхода электронов средних энергий для полубесконечных образцов и образцов типа слой на подложке. Эти результаты важны для процедур диагностики материалов, базирующихся на явлении электронной эмиссии. В параграфе 9.2 рассмотрена задача о расчете теплового воздействия электронного зонда на образец нитрида галлия. Распределение плотности источников тепла при этом

рассчитывается с помощью моделирования по методу Монте-Карло. В параграфе 9.3 с помощью метода Монте-Карло получены оценки пространственного разрешения в методах регистрации изображения, основанных на рентгеновской фотоэмиссии. Наконец, в последнем параграфе описаны задачи, где расчеты плотности генерации рентгеновского излучения при облучении мишени электронным пучком позволили разработать методику диагностики нанометровых слоев In (Cd) в однородных образцах GaAs (ZnSe). Диагностика проводилась с помощью рентгеноспектрального микроанализа

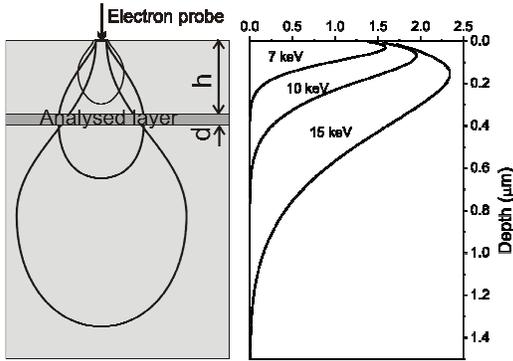


Рисунок 4. Область генерации рентгеновского излучения и зависимость плотности генерации рентгеновского излучения от глубины при различных энергиях электронного пучка

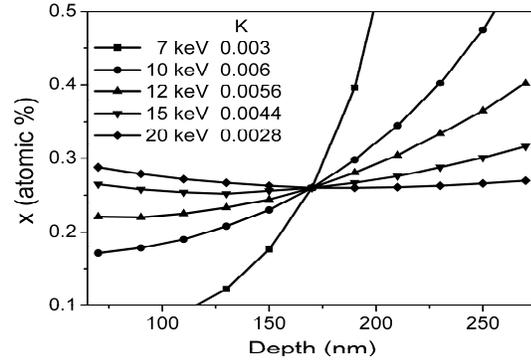


Рисунок 5. Зависимости состава тонкого слоя от глубины его залегания при различных энергиях электронного пучка. Общая точка соответствует истинным значениям глубины и состава слоя.

при различных энергиях электронного пучка. Плотность генерации рентгеновского излучения для заданных энергий рассчитывалась методом Монте-Карло. При этом считалось, что наличие исследуемого элемента не влияет на распределение электронов. Получившиеся профили плотности генерации рентгеновского излучения  $\varphi(z, E)$  представлены на рисунке 4. При малой толщине слоя  $d_0$  отношение интенсивностей излучения в линии от образца и эталона ( $K$ -отношение) имеет вид

$$K(E) = \frac{Nd_0\varphi(z_0, E) \exp\left(-\sum_{i=1}^{n_l} \mu_i d_i / \cos \gamma\right)}{N_{st} \int_0^{\infty} \varphi_{st}(z, E) \exp(-\mu_{st} z / \cos \gamma) dz} \quad (37)$$

Здесь  $N$  - концентрации искомого элемента в слое,  $z_0$  - глубина залегания слоя,  $n_l$  - число слоев, лежащих ближе к поверхности, чем анализируемый слой,  $\mu_i$  и  $d_i$  - линейные коэффициенты поглощения и толщины этих слоев,  $\gamma$  - угол регистрации излучения. В знаменателе индексом 'st' обозначены те же величины для эталона. При известных  $K$ ,  $d_i$  и  $\mu_i$  из (37) легко определяется отношение концентраций атомов анализируемого элемента в исследуемом образце и в эталоне  $\eta = N/N_{st}$ :

$$\eta = \frac{1}{d_0} g(z_0, E), \quad g(z_0, E) = \frac{K(E) \int_0^{\infty} \varphi_{st}(z, E) \exp(-\mu_{st} z / \cos \gamma) dz}{\varphi(z_0, E) \exp\left(-\sum_{i=1}^{n_l} \mu_i d_i / \cos \gamma\right)} \quad (38)$$

Молярная концентрация анализируемого элемента  $x$  в соединении  $A_x B_{1-x} C$  однозначно связана с концентрацией  $N$ . Зависимости  $x$  от глубины залегания при различных энергиях пучка приведены на рисунке 5. Рассчитанный по такой методике состав слоя хорошо согласуется с данными, полученными методами рентгеновской дифракции и просвечивающей электронной микроскопии.

Расчет плотности генерации рентгеновского излучения был использован также для разработки методики определения параметров распределения концентрации примеси в приповерхностном слое глубиной 0,1-1,0 мкм. Эта методика основана на вариации энергии электронного зонда и последующей обработке полученных данных в предположении о заданной форме распределения. Методом Монте-Карло рассчитывалось распределение рентгеновского излучения. В качестве модельных распределений выбирались ступенчатое распределение и распределение Гаусса. Вычислялось  $K$ -отношение и находились параметры модельных распределений путем минимизации функционала

$$\chi^2 = \frac{1}{(N-p)} \sum_{k=1}^N (\tilde{K}(E_k) - K(E_k; \bar{P}))^2 / \tilde{\sigma}_k^2. \quad (39)$$

Здесь  $E_k$  – значения энергии электронного зонда в эксперименте,  $\tilde{K}(E_k)$  – относительные интенсивности рентгеновского излучения, измеренные в эксперименте,  $K(E; \bar{P})$  – те же интенсивности, рассчитанные для модельных распределений,  $\bar{P}$  – массив значений параметров распределения,  $\tilde{\sigma}_k^2$  – дисперсии экспериментальных данных,  $N$  – число экспериментальных точек по энергии,  $p$  – число параметров ( $p = 3$ ).

С помощью такого алгоритма было найдено распределение концентрации алюминия в образце  $SiC$  после имплантации и последующего отжига. Полученные результаты находятся в согласии с данными ВИМС.

Результаты исследований, представленных в главе 9, опубликованы в работах [16, 18, 22, 25, 28, 29, 30, 34].

В **заключении** сформулированы основные результаты, полученные в работе.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе проведен анализ и разработаны методы решения линейного кинетического уравнения, являющегося теоретической основой для описания процесса транспорта электронов средних энергий. Расчет распределения электронов, в свою очередь, является ключевой проблемой для широкого класса современных диагностических методов. Перечислим основные результаты, полученные в работе:

1. Проведено исследование собственных чисел упругой части интеграла столкновений, которое выявило структуру оператора рассеяния на большие углы и позволило сравнить спектр интеграла столкновений со спектром аппроксимирующих его операторов. Для корректного асимптотического разложения неупругой части интеграла столкновений проведено обобщение способа асимптотического разложения интегралов с  $\delta$ -образным ядром, убывающим степенным образом, на случай зависимости ядра от медленной переменной
2. В случае мишеней с большими атомными номерами проведено разделение процессов угловой и энергетической релаксации с помощью схемы асимптотического расщепления.
3. Исследована координатная асимптотика пограничного слоя эффективной изотропизации и на основе процедуры сращивания асимптотических разложений в пограничном слое и в области диффузии получен алгоритм отыскания граничных условий, который замыкает общий процесс построения последовательных приближений равномерного асимптотического разложения.
4. Исследована структура пограничных слоев, возникающих в задаче о взаимодействии моноэнергетического мононаправленного пучка электронов средних энергий с полубесконечной тяжелой мишенью. Применимость различных приближений, используемых в кинетике электронов средних энергий, связана с малостью безразмерных параметров задачи. Проведено объединение приближенных моделей в единую схему, описывающую процесс релаксации электронов в различных масштабах длин, углов и энергий.
5. Получено аналитическое решение кинетического уравнения в области диффузии в задаче о взаимодействии пучка с мишенью. В диффузионном приближении решены также задачи о расчете функции выхода электронов из однородного образца и образца типа слой на подложке.
6. Получена асимптотика матричных элементов интеграла столкновений при больших индексах и разработаны процедуры построения линейных ядер интеграла столкновений, возникающих при использовании разложения по сферическим гармоникам, для псевдомаксвелловских молекул и твердых шаров.
7. Показано, что для степенных потенциалов ядра интегралов прямых и обратных столкновений обладают свойством подобия, т.е. являются однородной функцией своих аргументов.
8. Установлено, что ядра интеграла прямых столкновений выражаются через ядра некоторых линейных интегральных операторов, которые в случае степенных потенциалов также обладают свойством подобия. Ядра интеграла прямых столкновений выражаются через полное сечение с помощью одной квадратуры.
9. На основе инвариантности относительно выбора скорости системы отсчета получены связи между ядрами интеграла столкновений. Разработана рекуррентная процедура последовательного определения ядер. Получены аналитические выражения для ядер с суммой индексов, не превосходящей 4, в случае твердых шаров и псевдомаксвелловских молекул.

10. Решена задача однородной изотропной релаксации с использованием найденных ядер. Показано, что использование ядер нелинейного интеграла столкновений успешно описывает процесс релаксации даже в случае нарушения условия сходимости разложения ФР в стандартном моментном методе.

11. На основе использования ядер интеграла столкновений и модифицированного метода дискретных ординат разработан метод решения граничных кинетических задач для электронов средних энергий.

12. Разработаны три программных пакета для моделирования транспорта электронов по методу Монте-Карло и создана база данных по сечениям упругого и неупругого рассеяния электронов. Разработанные методы расчета транспорта электронов применены к исследованию стимулированной рентгеновским излучением электронной эмиссии, изучению нагрева образца электронным пучком и к решению задач диагностики материалов с помощью рентгеноспектрального микроанализа.

### СПИСОК ПУБЛИКАЦИЙ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

[1] Л. А. Бакалейников, Э. А. Тропп. Асимптотическая форма уравнения переноса для быстрых электронов с учетом динамики атома в решетке кристалла // ЖТФ, **51**, 233-238 (1981).

[2] Л. А. Бакалейников. Исследование собственных чисел интеграла столкновений при упругом рассеянии быстрых электронов на экранированном кулоновском потенциале. // ЖТФ, **52**, 147-149 (1982).

[3] Л. А. Бакалейников. Асимптотическое преобразование неупругой части интеграла столкновений для быстрых электронов // ЖТФ, **54**, 1241-1245 (1984).

[4] Л. А. Бакалейников, Э. А. Тропп. Пограничные слои в задаче релаксации пучка электронов средних энергий в полубесконечных тяжелых мишенях // ЖТФ, **56**, 16-26 (1986).

[5] Л. А. Бакалейников, Э. А. Тропп. Структура решения кинетического уравнения в задаче о взаимодействии электронного пучка с тяжелой мишенью // В кн «Методы рентгеноспектрального анализа», Новосибирск, «Наука», Сиб.Отд., 1986, стр.111-120.

[6] Л. А. Бакалейников, С. Г. Конников, В. З. Латута, К. Ю. Погребицкий, Ю. Г. Пухов, Н. Н. Фалеев. Способ определения состава и толщин слоев в многослойных твердых телах. // Авт. свид. №1373139.

[7] Л. А. Бакалейников, С. Г. Конников, В. А. Соловьев, В. Е. Уманский. Анизотропия энергетического спектра отраженных электронов на гетеропереходе // Изв.АН СССР, сер. Физическая, **51**, 458-461 (1987).

[8] L. A. Bakaleinikov, E. A. Tropp The kinetic equation based calculation of the electron distribution in the target exposed to the electron beam // X-Ray Spectrometry, **23**, 125-129 (1994).

[9] Л. А. Бакалейников, С. Г. Конников, К. Ю. Погребицкий, Д. Ж. Сайфидинов, Э. А. Тропп, Ю. Н. Юрьев. Определение функции выхода для

электронов средних энергий на основе использования кинетического уравнения // ЖТФ, **64**, 9-16 (1994).

[10] L. A. Bakaleinikov, S. G. Konnikov, K. Ju. Pogrebitsky, Yu. N. Yur'ev, A. A. Vereninov, R. Svagera, R. Kaitna, G. Barnegg-Golwig. A New Nondestructive Quantitative Composition Depth Profiling Technique Based on X-ray Exited Electron Emission // Advances in X-Ray Analysis, **35**, 1243-1246 (1992).

[11] Yu. N. Yur'ev, K. Ju. Pogrebitsky, L. A. Bakaleinikov, I. I. Lodyzhensky and S. G. Konnikov. Simulation of X-ray Exited Electron Emission in Vicinity of K-shell Electron Binding Energies // Phys.Low.-Dim.Struct., **8**, 55-64 (1994).

[12] L. A. Bakaleinikov, V. V. Tretyakov. The influence of elastic and ionization cross section approximations on the result of Monte Carlo simulation // Scanning, **16**, Suppl.IV, May/June, IV-61 – IV-62 (1994).

[13] L. A. Bakaleinikov, V. V. Tretyakov. The influence of film composition and features of the electron-matter interaction on X-ray generation in substrate in film/substrate system // Scanning, **18**, 231 (1996).

[14] L. A. Bakaleinikov, S. G. Konnikov, K. Ju. Pogrebitsky, E. A. Tropp, Yu. N. Yur'ev, S. A. Song. Simulation of the X-ray Induced Electron Emission at the Absorption Edge // The Nucleus, **34**, 1-9 (1997).

[15] Е. Ю. Флегонтова, Л. А. Бакалейников, К. Ю. Погребницкий, Hwack-Joo Lee, Yang-Koo Cho, Hyun-Min Park and Yong-Won Song. Эффективная реализация расчета потери энергии и угла рассеяния при неупругом взаимодействии электрона с веществом // ЖТФ, **70**, 6-11 (2000).

[16] Е. Ю. Флегонтова, Л. А. Бакалейников, К. Ю. Погребницкий, Hwack-Joo Lee, Yang-Koo Cho, Hyun-Min Park and Yong-Won Song. Аналитический и численный подходы к расчету функции выхода электронов средних энергий из однородных образцов // ЖТФ, **71**, 14-20 (2001).

[17] Е. Ю. Флегонтова, Л. А. Бакалейников, К. Ю. Погребницкий, Hwack-Joo Lee, Yang-Koo Cho, Hyun-Min Park and Yong-Won Song. Расчет функции выхода и фотоэмиссии электронов средних энергий из образцов типа слой на подложке // ЖТФ, **72**, 119-129 (2002).

[18] Л. А. Бакалейников, Е. В. Галактионов, В. В. Третьяков, Э. А. Тропп. Расчет теплового воздействия электронного зонда на образец нитрида галлия // ФТТ, **43**, 779-785 (2001).

[19] Л. А. Бакалейников, Э. А. Тропп, А. Я. Эндер, И. А. Эндер. Асимптотика матричных элементов интеграла столкновений в изотропном случае // ЖТФ, **73**, 12-23 (2003).

[20] Л. А. Бакалейников, М. В. Заморянская, Е. И. Колесникова, В. И. Соколов, Е. Ю. Флегонтова. Модификация диоксида кремния электронным пучком // ФТТ, **46**, 989-994 (2004).

[21] Л. А. Бакалейников, Е. Ю. Флегонтова, К. Ю. Погребницкий, И. В. Еремин. Теоретические принципы работы полупроводникового детектора, основанного на p-n-переходе // ЖТФ, **74**, 77-85 (2004).

- [22] L. A. Bakaleinikov, E. Yu. Flegontova, E. Zolotoyabko. Combined x-ray-electron imaging techniques: limitation on lateral resolution // *Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena*, **151**, 97-104 (2006).
- [23] Л.А.Бакалейников, А.Я.Эндер, И.А.Эндер. Расчет линейного ядра интеграла столкновений в случае псевдомаксвелловских молекул // В кн. «Вопросы математической физики и прикладной математики», СПб, 2005, 133-148.
- [24] Л. А. Бакалейников, А. Я. Эндер, И. А. Эндер. Расчет линейного ядра интеграла столкновений в случае псевдомаксвелловских молекул // *ЖТФ*, **76**, 6-15 (2006).
- [25] Т. Б. Попова, Л. А. Бакалейников, М. В. Загорянская, Е. Ю. Флегонтова. Рентгеноспектральный микроанализ полупроводниковых эпитаксиальных гетероструктур на основе моделирования транспорта электронов методом Монте-Карло // *ФТП*, **42**, 686-691 (2008).
- [26] E. Yu. Flegontova, L. A. Bakaleinikov, Ki-Yong Nam, Jung Gon Park, Kyong-Woo Kim, Kwon Su Chon, Kwon-Ha Yoon. Monte Carlo Simulation of X-ray Source Characteristics Using MCPETS and MCNPX Codes for Mammography // *Journal of the Korean Physical Society*, **51**, 65-77 (2007).
- [27] Л. А. Бакалейников, Е. Ю. Флегонтова, А. Я. Эндер, И. А. Эндер. Расчет линейного ядра интеграла столкновений для потенциала твердых шаров // *ЖТФ*, **79**, 22-35 (2009).
- [28] Т. В. Попова, Е. Ю. Флегонтова, Л. А. Бакалейников, and М. В. Загорянская. Monte Carlo calculations in X-ray microanalysis of epitaxial layers // *Microchimica Acta*, **161**, 459-463 (2008).
- [29] Y. V. Domracheva, L. A. Bakaleinikov, E. Y. Flegontova, V. N. Jmerik, T. V. Popova, M. V. Zamoryanskaya. Investigation of In, Ga, N layers by local methods // *Microchimica Acta*, **161**, 371-375 (2008).
- [30] Л. А. Бакалейников, Я. В. Домрачева, М. В. Загорянская, Е. В. Колесникова, Т. Б. Попова, Е. Ю. Флегонтова. Послойный рентгеноспектральный микроанализ полупроводниковых структур методом вариации энергии электронного зонда // *ФТП*, **43**, 568-573 (2009).
- [31] А. Я. Эндер, И. А. Эндер, Л. А. Бакалейников. Некоторые общие свойства нелинейного интеграла столкновений уравнения Больцмана // *ЖТФ*, **80**, 12-21 (2010).
- [32] А. Я. Эндер, И. А. Эндер, Л. А. Бакалейников, Е. Ю. Флегонтова. Матричные элементы и ядра интеграла столкновений уравнения Больцмана // *ЖТФ*, **81**, 24-34 (2011).
- [33] А. Я. Эндер, И. А. Эндер, Л. А. Бакалейников, Е. Ю. Флегонтова. О некоторых общих свойствах нелинейных ядер интеграла столкновений уравнения Больцмана // В кн. «Вопросы математической физики и прикладной математики», СПб, 2010, 8-17.
- [34] Т. Б. Попова, Л. А. Бакалейников, Е. Ю. Флегонтова, А. А. Шахмин, М. В. Загорянская. Рентгеноспектральный микроанализ гетероструктур с наноразмерными слоями // *ФТП*, **45**, 263-267 (2011).

- [35] А. Я. Эндер, И. А. Эндер, Л. А. Бакалейников. Связи между нелинейными ядрами интеграла столкновений // ДАН, **437**, 1-3 (2011).
- [36] А. Я. Эндер, И. А. Эндер, Л. А. Бакалейников, Е. Ю. Флегонтова. Построение некоторых ядер нелинейного интеграла столкновений уравнения Больцмана с помощью преобразования Лапласа // ЖТФ, **82**, 1-8 (2012).
- [37] A. Ya. Ender, I. A. Ender, L. A. Bakaleinikov, E. Yu. Flegontova. Recurrence relations between kernels of the nonlinear Boltzmann collision integral // Europ.J.Mech B/Fluids **36**, 17-24 (2012).

## СПИСОК ЦИТИРОВАННОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

- [1\*] А.Н.Тихонов, А.А.Самарский, А.А.Арсеньев. Об одном методе асимптотических оценок интегралов //ЖВММФ, **12**(4), 1005-1012 (1972)
- [2\*] Н.А.Гунько, Э.А.Тропп. Асимптотическое преобразование упругого столкновительного члена в кинетическом уравнении для быстрых электронов // Письма в ЖТФ, **6**, 372-375 (1980)
- [3\*] Э.А.Тропп. Асимптотическое расщепление многомасштабных статических и квазистационарных задач термомеханики и электродинамики сплошной среды: Автореф. дисс... доктора физ.-мат. наук. - Ленинград, 1984. – 32с.
- [4\*] К.Черчиньяни. Теория и приложения уравнения Больцмана. - М.: Мир, 1978. - 495 с.
- [5\*] M.V.Kruglov, I.K.Solomin, A.V.Lunev. Determination of the photoemission generation depth with use of experiments on the dynamic scattering of X-Rays // Phys.Stat.Sol. (b), **133**(1), 47-55 (1986)
- [6\*] В.Н.Щемелев, И.Р.Тагиров, А.Буабеллу, Е.А.Созонтов. Контроль состава в приповерхностной области полупроводниковых кристаллов методом скачков рентгеновского фотоэффекта // Поверхность, № 11, 56-61 (1983)
- [7\*] А.Я.Эндер, И.А.Эндер. Интеграл столкновений уравнения Больцмана и моментный метод. - СПб, 2003. - 224с.
- [8\*] E.Hecke. Uber die Integralgleichung der kinetischen Gastheorie // Math. Zs., **12**, 274-286 (1922)
- [9\*] А.Я.Эндер, И.А.Эндер. Аналитическое представление линейных ядер интеграла столкновений уравнения Больцмана для максвелловских молекул // Письма в ЖТФ, **37**(5), 9-14 (2011)
- [10\*] D.Hilbert. Begründung der kinetischen Gastheorie // Math. Ann., **72**(1), 562-577 (1912)
- [11\*] Н.Н.Лебедев. Специальные функции и их приложения. - Л.: Гос. Изд. физ.-мат. лит., 1963. - 358 с.
- [12\*] А.В.Бобылев. О точных решениях уравнения Больцмана // ДАН СССР, **225**(6), 1296-1299 (1975)
- [13\*] G.Wick. Uber ebene diffusionprobleme // Zeit.Phys., **121**, 702-718 (1943)
- [14\*] С.Чандрасекар. Перенос лучистой энергии. - М.: Изд.иностр.лит., 1953. - 432с.
- [15\*] S.K.Loyalka. Temperature jump and thermal creep slip: Rigid sphere gas // Phys. Fluids A **1** (2), 403-408 (1989)