

01;06

Эффективная реализация расчета потери энергии и угла рассеяния при неупругом взаимодействии электрона с веществом

© Е.Ю. Флегонтова,¹ Л.А. Бакалейников,¹ К.Ю. Погребницкий,¹
Hwack-Joo Lee,² Yang-Koo Cho,² Hyun-Min Park,² Yong-Won Song²

¹ Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН,
194021 Санкт-Петербург, Россия

² Korea Research Institute of Standards and Science, Taejeon, Republic of Korea

(Поступило в Редакцию 1 марта 2000 г.)

Предлагается способ расчета результатов неупругого взаимодействия электрона с веществом, базирующийся на использовании дважды дифференциального сечения неупругого рассеяния и ориентированный на эффективную реализацию метода Монте-Карло. Разработан алгоритм, позволяющий наиболее экономично с точки зрения использования вычислительных ресурсов моделировать неупругое взаимодействие электрона с веществом с помощью дважды дифференциального сечения, которое в свою очередь рассчитывалось в рамках существующего подхода с использованием данных об оптической диэлектрической проницаемости вещества.

Задачи диагностики перспективных материалов и в том числе квантово-размерных структур, обладающих активными областями с размерами порядка несколько десятков атомов, требуют определения параметров исследуемых объектов с как минимум нанометровым разрешением. Здесь практически важным и перспективным направлением является дальнейшее развитие широкого класса методов, основанных как на использовании электронов в качестве зондирующего возбуждения, так и на регистрации электронов в качестве основного сигнала. Наиболее известными из них являются рентгено-спектральный микроанализ (EPMA). Оже-спектроскопия (AES), рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия (XPS), спектрометрия электронной эмиссии, возбуждаемой рентгеновским излучением (XIEES). Применение этих методик позволяет определять химический состав, размеры неоднородностей (толщины слоев), атомную структуру, электронное строение и прочие характеристики образца с субатомным разрешением. Для количественного определения искоемых параметров, т.е. для моделирования основных эффектов, требуется информация о функции распределения электронов. Она может быть получена из кинетического уравнения, одним из наиболее простых и универсальных численных методов решения которого является метод Монте-Карло. Ресурсы современной вычислительной техники позволяют использовать модели однократного рассеяния, в которых результаты каждого акта взаимодействия электрона с веществом определяются дифференциальными сечениями различных процессов. При этом оптимальность, а можно сказать, что и сама возможность программной реализации метода Монте-Карло зависят от формы представления информации о дифференциальных сечениях.

В работе предлагается способ расчета результатов неупругого взаимодействия электрона с веществом, базирующийся на использовании дважды дифференциального сечения неупругого рассеяния и ориентированный на эффективную реализацию метода Монте-Карло.

Как известно [1], неупругое взаимодействие электрона с веществом может быть описано в терминах диэлектрической проницаемости $\tilde{\epsilon}(q, \omega)$, которая связана с дважды дифференциальным сечением неупругого рассеяния соотношением,

$$\frac{d^2\sigma}{d(\hbar\omega)d(\hbar q)} = \frac{1}{\pi a_0 q E} \text{Im} \left(-\frac{1}{\tilde{\epsilon}(q, \omega)} \right). \quad (1)$$

Здесь E — энергия электрона, отсчитываемая от дна зоны проводимости; $\hbar\omega$ и $\hbar q$ — изменение энергии и импульса электрона в результате неупругого рассеяния; $a_0 = \hbar^2/me^2$ — боровский радиус. Аналитическое выражение для диэлектрической проницаемости $\tilde{\epsilon}(q, \omega)$, зависящей от частоты и волнового вектора, известно лишь в некоторых простых случаях, например когда применимо приближение газа невзаимодействующих электронов. В остальных ситуациях необходимо использовать экспериментальные данные. Однако известные результаты экспериментов по EELS относятся к области малых q , а оптические эксперименты дают лишь значения $\tilde{\epsilon}(0, \omega)$. Таким образом, функция $\text{Im}(-1/\tilde{\epsilon}(q, \omega))$ оказывается определенной лишь в окрестности прямой $q = 0$. Для расширения области определения $\text{Im}(-1/\tilde{\epsilon}(0, \omega))$ на всю плоскость можно воспользоваться методом экстраполяции, предложенным в работах [2–4]. Суть его заключается в том, что $\text{Im}(-1/\tilde{\epsilon}(q, \omega))$ представляется в виде интеграла по частотам возможных возбуждений плазмонов, при этом связь между ω, q и плазмонной частотой ω_p дается дисперсионным соотношением

$$\omega = \omega_q(q, \omega_p).$$

Полученное в результате экстраполяции $\text{Im}(-1/\tilde{\epsilon}(0, \omega))$ выражение для дважды дифферен-

циального сечения неупругого рассеяния имеет вид [4]

$$\frac{d^2\sigma}{d(\hbar\omega)d(\hbar q)} = \frac{1}{\pi a_0 q E} \frac{\omega_0}{\omega} \operatorname{Im} \left(-\frac{1}{\varepsilon(\hbar\omega_0)} \right), \quad (2)$$

где $\varepsilon(\hbar\omega) = \tilde{\varepsilon}(0, \omega)$ — оптическая диэлектрическая проницаемость, ω_0 — положительное решение уравнения

$$\omega = \omega_q(q, \omega_0).$$

Интегрирование дважды дифференциального сечения (2) по всем возможным значениям переданного импульса (т. е. по всем возможным углам неупругого рассеяния) дает выражение для дифференциального сечения по потерям энергии

$$\frac{d\sigma}{d\hbar\omega} = \int_0^{\hbar q_{\max}} \frac{d^2\sigma}{d(\hbar\omega)d(\hbar q)} d\hbar q. \quad (3)$$

Здесь $\hbar q_{\max}$ — максимально возможное значение переданного импульса. Конкретная форма зависимости $\omega_0(\omega, q)$, а следовательно дифференциальных сечений (2) и (3), определяется выбором дисперсионного соотношения. В столкновениях с большой передачей энергии и импульса электрон ведет себя как классический объект, поэтому $\omega_q \rightarrow \hbar q^2/2m$ при $q \rightarrow \infty$. Дисперсионные соотношения, удовлетворяющие этому условию, могут быть выбраны в различных формах. В работах [5,6] дисперсионное соотношение аппроксимировалось полученным в [7] выражением

$$\omega_q^2 = \omega_0^2 + \frac{1}{2} v_F^2 (\omega_0) q^2 + (\hbar q^2/2m)^2, \quad (4)$$

где v_F — скорость Ферми.

Выбор дисперсионного соотношения в виде

$$\omega_q = \omega_p + \frac{\hbar q^2}{2m}, \quad (5)$$

предложенном в [8,9], приводит к наиболее простому выражению для решения ω_0 уравнения (2)

$$\omega_0 = \omega - \frac{\hbar q^2}{2m}. \quad (6)$$

Использование (6) существенно облегчает расчет величин, описывающих неупругое взаимодействие электрона с веществом. В то же время, как показано в [3], различие в длинах свободного пробега, найденных с помощью выражений (4) и (5), при $E > 100$ eV незначительно. Подстановка (2), (6) в (3) дает

$$\frac{d\sigma}{d\hbar\omega} = \frac{1}{4\pi^2 a_0 E} \int_0^{2(\hbar\omega - E + \sqrt{E(E - \hbar\omega)})} \frac{x}{(\hbar\omega - x)\hbar\omega} \operatorname{Im} \left(\frac{-1}{\varepsilon(x)} \right) dx. \quad (7)$$

Дифференциальное сечение по потерям энергии (7) было рассчитано нами для Al, Au и Ge в диапазоне

энергий $5 \text{ eV} < E < 30 \text{ keV}$. Анализ полученных зависимостей позволил сделать некоторые выводы о свойствах (7). Так, оказалось, что для энергий электрона порядка единиц keV и выше (7) может быть приближенно представлено в виде

$$\frac{d\sigma}{d\hbar\omega} \approx C(E) W(\hbar\omega), \quad (8)$$

т. е. в этом диапазоне энергий форма зависимости дифференциальных сечений от потери энергии для данного вещества описывается универсальной функцией $W(\hbar\omega)$ и не зависит от энергии налетающего электрона E . При энергиях E и потерях энергии $\hbar\omega$, много больших потенциалов ионизации всех электронных оболочек, дифференциальное сечение (7) асимптотически приближается к сечению свободно-свободного электронного взаимодействия [10], в связи с чем функции $W(\hbar\omega)$ и $C(E)$ имеют асимптотику

$$W(\hbar\omega) \rightarrow 1/(\hbar\omega)^2, \quad C(E) \rightarrow C_0/E. \quad (9)$$

Здесь C_0 — константа, зависящая от состава мишени. При $\hbar\omega$ порядка десятков eV функция $W(\hbar\omega)$ имеет достаточно сложную структуру, отражающую форму $\operatorname{Im}(-1/\varepsilon(\hbar\omega))$. Тем не менее она может быть аппроксимирована аналитическим выражением, в которое, естественно, входит большое число параметров, определяющих положение и характер основных особенностей. Этот способ описания $W(\hbar\omega)$ оказывается все же эффективнее, чем просто задание массивом значений, и несет в себе больше информации об ее структуре. Аналитическое выражение, аппроксимирующее $W(\hbar\omega)$, имеет вид

$$W(x) = x^{-2-\rho} \prod_{k=1}^n \left[1 + \left(\frac{x}{d_k} \right) \right]^{r_k} W_0(x), \quad (10)$$

$$\rho = \sum_{k=1}^n r_k,$$

$$W_0(x) = \prod_{i=1}^m \left[\operatorname{arctg} \left(\alpha_i \left(\frac{x}{w_i} - 1 \right) \right) + \frac{\pi}{2} \right]^{\gamma_i} \times \left[\operatorname{arctg} \left(\beta_i \left(\frac{w_i}{x} - 1 \right) \right) + \frac{\pi}{2} \right]^{\gamma_i}. \quad (11)$$

Первые два множителя в (10) определяют общую форму кривой $W(x)$ и обеспечивают ее правильное асимптотическое поведение при больших x , а каждый из множителей в произведении (11) задает положение и форму одного из пиков. В таблице представлены значения параметров $r_k, d_k, \alpha_i, \beta_i, \gamma_i, w_i, n, m$, найденные для Al, Au и Ge. На рис. 1–3 приведены графики дифференциальных сечений, рассчитанных по формуле (7) и аппроксимированных зависимостью (10) при энергиях 2, 10 и 30 keV.

Параметры аппроксимации дифференциального сечения неупругого взаимодействия электрона с веществом

Al		Ge		Au	
$n = 1; m = 4$ $d_1 = 14; r_1 = -3.3$ $w_1 = 1.4, w_2 = 14.8$ $w_3 = 72, w_4 = 160$ $\alpha_1 = 155, \alpha_2 = 55$ $\alpha_3 = 5, \alpha_4 = 2$ $\beta_1 = 25, \beta_2 = 15$ $\beta_3 = 50, \beta_4 = 4$ $\gamma_1 = 0.4, \gamma_2 = 1.85$ $\gamma_3 = -0.5, \gamma_4 = 0.8$		$n = 2; m = 5$ $d_1 = 0.5; d_2 = 18$ $r_1 = 1.55, r_2 = -3.3$ $w_1 = 0.68, w_2 = 2$ $w_3 = 4, w_4 = 15$ $w_5 = 200$ $\alpha_1 = 1.7, \alpha_2 = 3$ $\alpha_3 = 8, \alpha_4 = 3.1$ $\alpha_5 = 2.5$ $\beta_1 = 18, \beta_2 = 10$ $\beta_3 = 4, \beta_4 = 4.55$ $\beta_5 = 3$ $\gamma_1 = -4.2, \gamma_2 = -0.8$ $\gamma_3 = -1, \gamma_4 = 1.6$ $\gamma_5 = 0.6$		$n = 1; m = 4$ $d_1 = 62; r_1 = -2.95$ $w_1 = 1, w_2 = 2.3$ $w_3 = 50, w_4 = 140$ $\alpha_1 = 1, \alpha_2 = 14$ $\alpha_3 = 1.5, \alpha_4 = 9$ $\beta_1 = 100, \beta_2 = 1$ $\beta_3 = 2, \beta_4 = 5$ $\gamma_1 = 0.14, \gamma_2 = 1.6$ $\gamma_3 = 3.8, \gamma_4 = -0.4$	
E, eV	$C(E), (\text{eV} \cdot \text{cm})^{-1}$	E, eV	$C(E), (\text{eV} \cdot \text{cm})^{-1}$	E, eV	$C(E), (\text{eV} \cdot \text{cm})^{-1}$
2000	52000	2000	0.35	2000	55.5
4000	29000	4000	0.2	4000	31.6
6000	21000	6000	0.145	6000	22.5
8000	16000	8000	0.115	8000	17.6
10000	12900	10000	0.093	10 000	14.5
12000	10700	12000	0.08	12 000	12.4
14000	9400	14000	0.07	14000	10.9
16000	8400	16000	0.06	16000	9.6
20000	6700	20000	0.05	20000	7.9
25000	5400	25000	0.042	25000	6.5
30000	4500	30000	0.034	30000	5.5

При численном моделировании траектории методом Монте-Карло для расчета потери энергии электрона и изменения направления его движения в результате неупругого взаимодействия с веществом последовательно решаются два трансцендентных уравнения.

Уравнение для определения потери энергии имеет вид

$$R = \frac{\int_0^{Q\hbar\omega_{\max}} \frac{d\sigma}{d\hbar\omega} d\hbar\omega}{\int_0^{\hbar\omega_{\max}} \frac{d\sigma}{d\hbar\omega} d\hbar\omega} = \frac{G_1(E, Q)}{G_1(E, 1)}, \quad (12)$$

где Q — относительная потеря энергии в неупругом столкновении; R — случайное число, равномерно распределенное в интервале $[0,1]$; $\hbar\omega_{\max}$ — максимально возможная потеря энергии, которая определяется соотношением

$$\hbar\omega_{\max} = \min(E, E - E_F),$$

где E_F — уровень Ферми.

Использование выражения (7) и перемена порядка интегрирования дает возможность привести интегралы, входящие в (12), к виду

$$G_1(E, Q) = \frac{1}{2\pi a_0 E} \int_0^{A(E, Q)} \text{Im} \left(\frac{-1}{\varepsilon(x)} \right) \ln \left[\frac{E(Q)(E_1 + x)}{E_1(E(Q) + x)} \right] dx,$$

где

$$E(Q) = \min \left(Q\hbar\omega_{\max} - x, \left(\sqrt{E} + \sqrt{E - 2x} \right)^2 / 4 \right),$$

$$E_1 = \left(\sqrt{E} - \sqrt{E - 2x} \right)^2 / 4,$$

$$A(E, Q) = \min(Q\hbar\omega_{\max}, E/2).$$

Заметим, что в области справедливости соотношения (8) функция G_1 может быть представлена в виде

$$G_1(E, Q) = C(E)S(Q\hbar\omega_{\max}), \quad (13)$$

где $S(x)$ — первообразная $W(x)$.

Определение результатов неупругого рассеяния из (12) неэффективно, так как требует решения трансцендентного уравнения на каждом шаге численного моделирования траектории. В связи с этим имеет смысл рассмотреть функцию $Q(E, R)$, неявно определяемую соотношением (12).

Выясним прежде всего некоторые свойства $Q(E, R)$, обусловленные асимптотическими свойствами (8), (9) дифференциального сечения неупругого рассеяния. При выполнении соотношения (13) зависимость Q от E сводится лишь к изменению масштаба, т. е.

$$Q = \frac{S^{-1}(RS(\hbar\omega_{\max}))}{\hbar\omega_{\max}}, \quad (14)$$

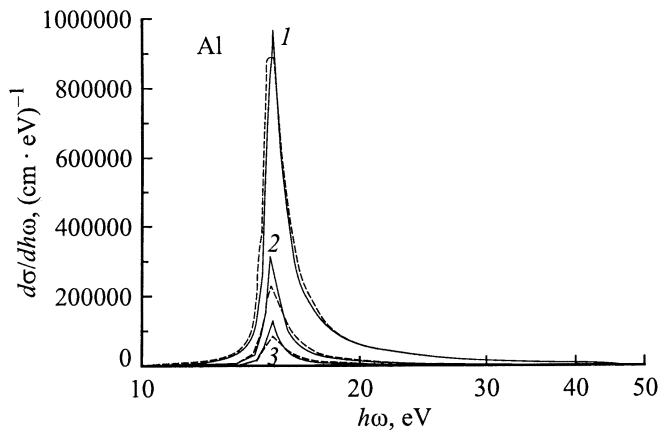


Рис. 1. Аппроксимация дифференциального сечения по потерям энергии аналитической зависимостью для Al. 1–3 — значения начальной энергии электрона $E = 2, 10, 30$ keV соответственно; сплошные кривые — расчет, штриховые — аппроксимация.

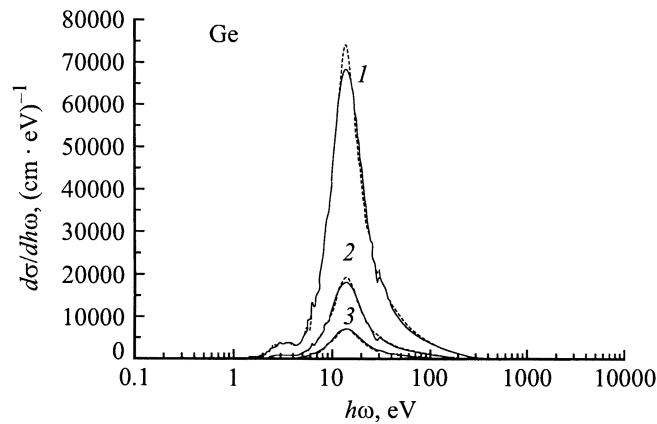


Рис. 2. То же, что и на рис. 1, для Ge. Обозначения те же.

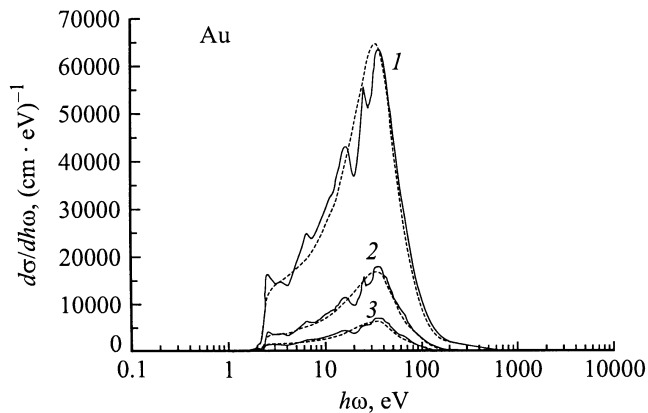


Рис. 3. То же, что и на рис. 1, для Au. Обозначения те же.

и не зависит от $C(E)$ в выражении (8). Используя выражение (8) и предполагая, что величины Q, Q_0 выбраны в области справедливости асимптотики функции W , для G_1 получим

$$G_1(E, Q) = G_1(E, Q_0) + \int_{Q_0 \hbar\omega_{\max}}^{Q \hbar\omega_{\max}} \frac{C(E)}{(\hbar\omega)^2} d\hbar\omega, \quad (15)$$

откуда следует, что

$$Q(E, R) = \frac{C_1}{C_2 - R}. \quad (16)$$

Здесь

$$C_1 = \frac{C(E)}{G_1(E, 1)\hbar\omega_{\max}}, \quad C_2 = \frac{G_1(E, Q_0)}{G_1(E, 1)} + \frac{C(E)}{G_1(E, 1)Q_0\hbar\omega_{\max}}.$$

Отметим, что соотношение (16) справедливо для $R > G_1(E, Q_0)/G_1(E, 1)$, что следует из положительности интеграла в (15). Анализ свойств функции $Q(E, R)$ позволил найти для нее аналитическую аппроксимацию в виде пятипараметрической зависимости

$$Q(E, R) = F(a(E), b(E), g(E), p(E), m(E), R),$$

где параметры a, b, g, p — кусочно-непрерывные функции E , а параметр m — кусочно-постоянная, определяющая общую форму кривой $F(R)$ (здесь и далее параметры a, b, g, p, m в списке аргументов опускаются).

Функция $F(R)$ определяется выражениями

$$F(R) = Z(R)/Z(1),$$

$$Z(R) = (G(R) + H(R) - H(0)) \arctg(5000cR),$$

$$G(R) = b \left[1 + \left(\frac{cR}{g} \right)^m \right]^{-\frac{p}{m}} (cR)^p,$$

$$H(R) = \left[\left(\frac{1}{1-g} \right)^{|m|} + \left(\frac{1}{1-cR} \right)^{|m|} \right]^{\frac{1}{|m|}},$$

$$c = \frac{1}{1+a}. \quad (17)$$

Легко видеть, что при $cR \rightarrow 1$ главную роль в выражении для $Z(R)$ играет слагаемое $H(R)$, при этом $F(R)$ стремится к виду (16). При положительных значениях параметра m это соответствует значениям аргумента $R > g/c$, а при $R < g/c$ функция $F(R)$ представляет собой степенную зависимость. Переход от одного участка зависимости $F(R)$ к другому тем более резок, чем больше значение параметра m . При отрицательных значениях параметра m функция $E(R)$ стремится к константе в области малых значений аргумента $R < g/c$, а в области $R > g/c$ оба слагаемых $H(R)$ и $G(R)$ дают вклад в функцию $Z(R)$. При выборе вида функции (17) учитывалось соотношение (14), из

которого видно, что в выражение для аппроксимирующей функции должен входить масштабный множитель. В выражении (17) масштабным множителем является величина c . Из сравнения выражений (14) и (17) следует, что при начальных энергиях электрона $E > E_0$, где E_0 величина порядка keV, зависимость аппроксимирующей функции от энергии выражается функцией $a(E)$, остальные параметры аппроксимации в этом диапазоне энергий постоянны.

При небольших энергиях, сравнимых с энергиями возбуждения плазмонов, форма $Q(E, R)$ обусловлена сложной структурой дифференциального сечения (7) в области плазменных пиков, а соотношения (8) и (9) не выполняются, поэтому выражение для аппроксимирующей функции $F_0(R)$ отличается от (17)

$$F_0(R) = 1 - Y(1 - R)^{g(1-Y(1-R))},$$

$$Y(R) = R \left(a + \frac{1-a}{1-p} \cdot \frac{1 - (1-R^b)^p - pR^b}{R^b} \right). \quad (18)$$

Функция $F_0(R)$ гибко меняет форму в зависимости от значений параметров.

Итак, при использовании аппроксимирующих зависимостей (17), (18) потери энергии в каждом неупругом столкновении вычисляются по простой аналитической формуле. Полная информация, необходимая для расчета потерь энергии в неупругом столкновении, содержится в пяти одномерных массивах $a(E)$, $b(E)$, $g(E)$, $p(E)$, $m(E)$, а при энергиях $E > E_0$ — в одном массиве $a(E)$.

Перейдем теперь к расчету угла рассеяния в неупругом взаимодействии. Изменение направления движения электрона в результате неупругого столкновения определяется из трансцендентного уравнения

$$R = G_2(E, \hbar\omega, \theta) / G_2(E, \hbar\omega, \theta_{\max}), \quad (19)$$

где R — как и раньше, случайное число, равномерно распределенное в интервале $[0,1]$; через $G_2(E, Q, \theta)$ обозначен интеграл

$$G_2(E, \hbar\omega, \theta) = \int_{B(E, \hbar\omega, \theta)}^{B(E, \hbar\omega, 0)} \frac{x}{\hbar\omega - x} \operatorname{Im} \left(\frac{-1}{\varepsilon(x)} \right) dx,$$

$$B(E, \hbar\omega, \theta) = 2 \left(\hbar\omega - E + \cos \theta \sqrt{E(E - \hbar\omega)} \right).$$

Максимально возможный угол рассеяния θ_{\max} определяется уравнением

$$B(E, \hbar\omega, \theta_{\max}) = 0.$$

Отыскание угла рассеяния из соотношения (19) требует знания трехмерного массива значений интеграла $G_2(E, \hbar\omega, \theta)$. Однако, вследствие того что $G_2(E, \hbar\omega, \theta)$ зависит от E и θ лишь через пределы интегрирования,

объем данных, необходимых для определения угла рассеяния, может быть значительно уменьшен. Действительно, вводя функцию

$$G(\hbar\omega, A) = \int_0^{D(\hbar\omega, A)} \frac{x}{\hbar\omega - x} \operatorname{Im} \left(\frac{-1}{\varepsilon(x)} \right) dx,$$

$$D(\hbar\omega, A) = B(A, \hbar\omega, 0) = 2 \left(\hbar\omega - A + \sqrt{A(A - \hbar\omega)} \right), \quad (20)$$

где параметр A связан с E и θ соотношением

$$\hbar\omega - E + \cos \theta - \sqrt{E(E - \hbar\omega)} = \hbar\omega - A + \sqrt{A(A - \hbar\omega)}.$$

Легко заметить, что

$$G_2(E, \hbar\omega, \theta) = G(\hbar\omega, A(E, 0)) - G(\hbar\omega, A(E, \theta)).$$

При численном моделировании неупругого столкновения значения $G(\hbar\omega, A)$ для произвольных $\hbar\omega$ и A находятся с помощью интерполяции. Можно оценить, как влияет ошибка интерполяции на точность определения угла рассеяния. Дифференцируя (20) по θ , найдем

$$d\theta = \frac{dG}{G'_D \sqrt{E(E - \hbar\omega)} \sin \theta},$$

$$G'_D = \frac{D(\hbar\omega, A)}{\hbar\omega - D(\hbar\omega, A)} \operatorname{Im} \left(-\frac{1}{\varepsilon(D(\hbar\omega, A))} \right).$$

Отсюда следует, что наиболее высокие требования к качеству интерполяции в области больших энергий, где $G'_D \sim \operatorname{Im}(-1/\varepsilon(\hbar\omega)) \sim 10^{-6} - 10^{-5} (\text{cm} \cdot \text{eV})^{-1}$. Это — область энергий, значительно больших, чем энергии возбуждения плазмонов и электронов из валентной зоны, поэтому подынтегральная функция меняется плавно везде, за исключением конечного числа точек, соответствующих возбуждению глубоких электронных оболочек. В этих точках подынтегральная функция в (20) терпит разрыв. Чтобы повысить точность интерполяции в окрестности точек разрыва, вместо $G(\hbar\omega, A)$ рассматривался интеграл от гладкой функции

$$\tilde{G}(\hbar\omega, A) = \int_0^{D(\hbar\omega, A)} \frac{xP(x)}{\hbar\omega - x} dx,$$

где

$$P(x) = \begin{cases} \operatorname{Im}(-1/\varepsilon(x)), & x > x_n, \\ \operatorname{Im}(-1/\varepsilon(x)) + \sum_{i=k}^n U_i, & x_{k-1} < x < x_k, \end{cases}$$

x_k — координаты точек разрыва подынтегральной функции,

$$U_i = \operatorname{Im}(-1/\varepsilon(x_i + 0)) - \operatorname{Im}(-1/\varepsilon(x_i - 0)).$$

Значения $G(\hbar\omega, A)$ легко получить из $G(\hbar\omega, A)$

$$G(\hbar\omega, A) = \tilde{G}(\hbar\omega, A) - \sum_{i=1}^k \int_0^{x_i} \frac{U_i x}{\hbar\omega - x} dx$$

$$- \int_0^A \left(\sum_{i=k+1}^n U_i \right) \frac{x}{\hbar\omega - x} dx,$$

$$x_k < D(\hbar\omega, A) < x_{k+1}.$$

Использование этого приема позволило уменьшить максимальные ошибки в определении угла неупругого рассеяния электронов в окрестности скачков подынтегральной функции с 0.2 до 0.05 rad.

В заключение отметим, что нами были оценены относительные ошибки в определении такой важной характеристики процесса рассеяния, как средние потери энергии на единицу длины δ_β . Расчет показал, что для Al при энергиях 0.1–15 keV относительные ошибки в определении средних потерь энергии на единицу длины $\delta_\beta < 0.015$, при энергиях 15–30 keV — $\delta_\beta < 0.025$. Для Au $\delta_\beta < 0.015$ при энергиях 0.1–30 keV. Для Ge $\delta_\beta < 0.02$ при энергиях 0.1–15 keV, $\delta_\beta < 0.04$ при энергиях 15–30 keV. Значения дифференциальных сечений рассеяния, рассчитанные по формуле (7), а также таблицы параметров аппроксимирующей функции для зависимости $Q(E, R)$ находятся на <http://www.ioffe.rssi.ru/ES>.

Итак, нами разработан алгоритм, позволяющий наиболее эффективно с точки зрения использования вычислительных ресурсов моделировать неупругое взаимодействие электрона с веществом с помощью дважды дифференциального сечения, которое в свою очередь рассчитывалось в рамках предложенного в [1–4] подхода с использованием данных об оптической диэлектрической проницаемости вещества.

Работа выполнена в рамках программы Миннауки РФ ”Поверхностные атомные структуры” (проект № 99-1.18) и Agreement KRIS/PTI 98-01.

Список литературы

- [1] *Пайнс Д.* Элементарные возбуждения в твердых телах. М.: Мир, 1965. 382 с.
- [2] *Penn D.R.* // Phys. Rev. B. 1987. Vol. 35. P. 482–486.
- [3] *Ding Z.-J., Shimizu R.* // Surf. Sci. 1989. Vol. 222. P. 313–331.
- [4] *Ding Z.-J.* Fundamental Studies on the Interactions of kV Electrons with solids for Applications to Electron Spectroscopies. PHD Thesis. Osaka University, 1990. 219 p.
- [5] *Tanuma S., Powell C.J., Penn D.R.* // Surf. Interface Anal. 1988. Vol. 11. P. 577.
- [6] *Brandt W. and Reinheimer J.* // Phys. Rev. B. 1982. Vol. 2. P. 3104.
- [7] *Lundqvist B.I.* // Phys. Kondens. Mater. 1967. Vol. 6. P. 206.
- [8] *Kwei C.M., Tung C.J.* // J. Phys. D. 1986. Vol. 19. P. 255–263.
- [9] *Tougaard S.* // Surf. Interface Anal. 1988. Vol. 11. P. 453.
- [10] *Петерсон Р.К.* Теория ионизации атомов электронным ударом. Рига: Зинатне, 1975. 190 с.