

**КИНЕМАТИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ПРОЦЕССА  
МНОГОКРАТНОГО РАССЕЯНИЯ КЛАССИЧЕСКИХ ЧАСТИЦ****А.И. Кульментьев***Институт прикладной физики НАН Украины  
ул. Петропавловская, 58, г. Сумы, 40030*

*Работа посвящена определению границ интервала энергий многократно рассеянных классических частиц. Рассматривается решение этой задачи, основанное на определении экстремальных значений скалярной целевой функции – энергии двукратно рассеянной частицы – с учетом геометрических связей, налагаемых на характеристики отдельных актов рассеяния. Для этого выведено преобразование скорости частицы при рассеянии на заданный угол в заданной орбитальной плоскости. Показано, как это преобразование можно обобщить на случай двукратного рассеяния, и для конкретного выбора системы координат получены соотношения между углами рассеяния и характеристиками орбитальных плоскостей для заданной геометрии эксперимента. Эти соотношения позволяют записать явное выражение для целевой функции, определить число независимых переменных и область их допустимых значений. Из решения оптимизационной задачи найдены граничные значения энергии частицы после двух рассеяний и проведено их сравнение с энергией однократно рассеянной частицы. Обсуждается возможность применения полученных результатов в различных методах анализа поверхности и приповерхностных областей.*

**1 ВВЕДЕНИЕ**

Одной из характерных тенденций развития современной физики является постоянное увеличение исследований процессов, происходящих на поверхности твердого тела. Существуют как фундаментальные, так и прикладные причины такого увеличения. С фундаментальной точки зрения поверхность твердого тела представляет фактически особое состояние вещества, у которого структура как ионного остова, так и электронной подсистемы отличается от аналогичных структур в объеме того же вещества. Двумерный характер поверхности приводит, в частности, к тому, что для некоторых явлений на ней – таких, как квантовый эффект Холла [1] – вообще нет трехмерных аналогов.

Существует большое число технологически важных процессов, в которых поверхность играет важную, а часто и ключевую роль. Наиболее известными примерами таких процессов являются гетерогенный катализ, производство полупроводниковых приборов и межзеренное разрушение технических материалов, обусловленное зернограничным охрупчиванием. По оценкам специалистов, "прямой и косвенный вклад катализа в экономику развитых стран составляет до 25% всеобщего валового продукта" [2]. Уже отсюда видно, что улучшение качества существующих катализаторов или замена их новыми, более дешевыми композициями может дать большой экономический эффект.

Наряду с перечисленными существует еще одна причина устойчивого роста интереса к поверхностным явлениям. Она связана с естественным стремлением к уменьшению размеров составных элементов устройств, для которых подобное уменьшение не приводит к ухудшению их характеристик. Ясно, что при этом происходит увеличение относительного вклада поверхности в свойства всего образца в целом. Однако эта закономерность будет выполняться до определенного предела, а именно до тех пор, пока возможно четкое разделение между

поверхностными и объемными состояниями. Например, для объектов нанофизики уже не вполне ясно, как могут быть разделены вклады поверхностных и объемных эффектов в свойства наноматериалов [3].

С физической точки зрения задачи, решаемые при исследовании поверхности, можно отнести к одному из следующих направлений: определение химического состава поверхности; выяснение ее пространственной структуры; изучение электронных свойств поверхности. Эти направления не являются полностью независимыми, поскольку, например, химический состав и пространственная структура поверхности однозначно определяют ее электронную структуру. Такое разделение производится в большей степени в силу традиции и, исходя из практических соображений, поскольку для каждого из направлений существует группа специализированных методов анализа.

Методы анализа поверхности весьма разнообразны, и среди них важное место занимают методы, использующие пучки ускоренных ионов. Принципы, лежащие в основе этих методов, зависят от тех физических процессов, которые инициирует пучок ионов, взаимодействующий с поверхностью. Во многих случаях результат воздействия пучка можно представить в виде совокупности независимых одночастичных испытаний, проводимых в неизменных условиях. В свою очередь, для отдельного иона его исходная кинетическая энергия  $E_0$  является тем параметром, который определяет тип доминирующего процесса при взаимодействии иона с поверхностью. При малых значениях  $E_0$  (не более нескольких десятков электронвольт) таким процессом является перенос заряда, который необходим для нейтрализации иона. При более высоких значениях  $E_0$  (0,1–10 кэВ) основным становится процесс передачи кинетической энергии от налетающего иона атомам поверхности, который часто имеет вид столкновения и для которого справедливы следующие приближения:

1) поскольку длины волн де Бройля обеих частиц пренебрежимо малы по сравнению с типичным межатомным расстоянием, то такое взаимодействие можно адекватно описать в рамках классической механики;

2) так как время взаимодействия много меньше периода тепловых колебаний атома, то можно считать, что последний до столкновения покоился;

3) и, наконец, поскольку передаваемая при столкновении энергия много больше энергии связи атома в решетке, то процесс взаимодействия можно рассматривать как классическое столкновение двух свободных тел, одно из которых до столкновения покоилось.

Методы анализа состава поверхности, в которых используются ионные пучки (обычно  $He^+$  или  $Ne^+$ ) с энергией 0,5–3 кэВ, основаны на анализе энергии рассеянных ионов и называются методами рассеяния медленных ионов (РМИ) или спектроскопией ионного рассеяния. Частицы, формирующие полезный сигнал в этом методе, можно разделить на совокупность непересекающихся подмножеств: однократно рассеянные ионы, ионы, испытавшие два, три и более столкновений с атомами мишени. Как правило, наибольший вклад в спектр дают однократно рассеянные частицы, и во многих случаях интерпретация спектра основана на приближении, в котором рассматриваются только такие частицы. Однако постоянно растущие требования к точности получаемых в эксперименте данных приводят к необходимости усовершенствования модели метода, в частности, к учету в ней процессов кратных столкновений.

Настоящая работа посвящена теоретическому описанию кинематики процесса двукратного рассеяния и определению границ энергетических областей спектра, в которых такие процессы вносят ненулевой вклад.

## 2 ПРЕОБРАЗОВАНИЕ СКОРОСТИ ЧАСТИЦЫ ПРИ РАССЕЯНИИ

Пусть  $\mathbf{v}_0$  – вектор скорости иона в пучке, а  $\mathbf{v}_i$  и  $\mathbf{v}_a$  – векторы скоростей соответственно иона и атома после столкновения (рис.1). В рамках приближений 1) – 3) движение частиц имеет плоский характер и происходит в орбитальной плоскости, определяемой векторами их относительного положения  $\mathbf{R}_{ia}$  и  $\mathbf{v}_0$ . Поэтому закон сохранения импульса можно записать в виде двух уравнений, выражающих сохранение компонент импульса всей системы в направлениях, параллельных и перпендикулярных вектору  $\mathbf{v}_0$ . Переменными в этих уравнениях, кроме скоростей  $\mathbf{v}_i$ ,  $\mathbf{v}_a$ , являются также углы рассеяния  $\theta_i$  и отдачи  $\theta_a$  (рис.1). Вместе с законом сохранения энергии получаем систему из трех уравнений относительно четырех неизвестных, из которой можно исключить любые два. Так, исключив  $\mathbf{v}_a$  и  $\theta_a$ , после несложных преобразований получим формулу, выражающую зависимость энергии  $E_i$  рассеянного иона от угла рассеяния

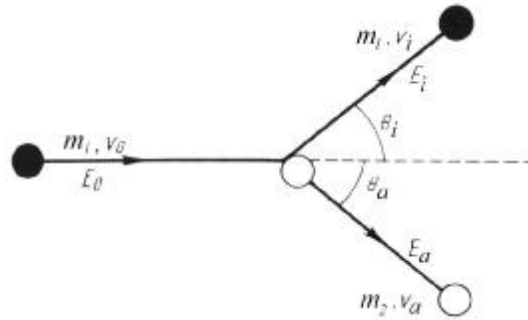


Рисунок 1 – Геометрия бинарного столкновения

$$E_i = K(\theta_i; \mu)E_0, \quad (1)$$

где

$$K(\theta_i; \mu) \equiv \frac{E_i}{E_0} = \frac{v_i^2}{v_0^2} = \left[ \frac{\cos \theta_i \pm \sqrt{\mu^2 - \sin^2 \theta_i}}{1 + \mu} \right]^2 \quad (2)$$

– так называемый кинематический множитель [4], а  $\mu$  – отношение массы  $m_2$  атома мишени к массе  $m_1$  иона. Аналогично, исключив  $v_i$  и  $\theta_i$ , получим зависимость энергии  $E_a$  атома от угла отдачи

$$\frac{E_a}{E_0} = \frac{4\mu}{(1 + \mu)^2} \cos^2 \theta_a. \quad (3)$$

С помощью векторных диаграмм [5] можно показать, что при  $m_1 > m_2$  ( $\mu < 1$ ) угол рассеяния  $\theta_i$  иона в лабораторной системе отсчета ( $L$ -системе) изменяется от 0 до  $\theta_{\max} = \arcsin \mu$ , и в соотношении (2) действительны оба знака. При  $m_1 < m_2$  ( $\mu > 1$ ) угол рассеяния может принимать любое значение из интервала  $[0, \pi]$ , а в соотношении (2) действителен только знак "+". В методе РМИ основной интерес представляет случай  $\mu > 1$ , и на рис. 2 показан график кинематического множителя как функции переменных  $\theta_i$  и  $\mu$  для  $\mu \geq 1$ .

В методе РМИ на исследуемую поверхность направляется почти моноэнергетический пучок и измеряется энергия первичных рассеянных ионов. Если направления падения и рассеяния определены достаточно точно, то величины  $E_0$ ,  $m_1$ ,  $\theta_i$  известны и фиксированы. Энергетические спектры РМИ часто имеют вид хорошо разделенных пиков. Измерив энергию  $E_i$  отдельного пика, можно в результате решения (относительно  $\mu$ ) уравнения (2) определить массу  $m_2$  соответствующего этому пику рассеивателя.

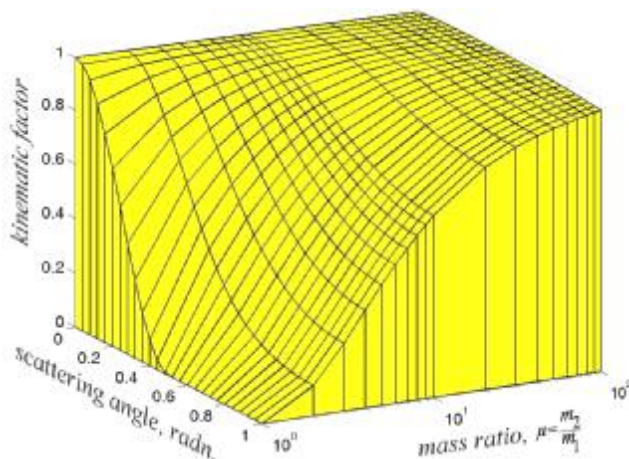


Рисунок 2 – Кинематический множитель  $K(\theta_i; \mu)$  (2) для  $\mu \geq 1$

Если на поверхности присутствуют два атома, массы которых различаются на величину  $\Delta m_2$ , то на основе выражения (2) для кинематического множителя можно получить уравнение, связывающее  $\Delta m_2$  с разностью энергий  $\Delta E_i$  ионов, рассеянных на этих атомах [6]:

$$\frac{m_2}{\Delta m_2} = \left( \frac{E_i}{\Delta E_i} \right) \frac{2\mu}{1 + \mu} \left( \frac{\mu + \sin^2 \theta_i - \cos \theta_i \sqrt{\mu^2 - \sin^2 \theta_i}}{\mu^2 - \sin^2 \theta_i + \cos \theta_i \sqrt{\mu^2 - \sin^2 \theta_i}} \right). \quad (4)$$

Уравнение (4) позволяет выяснить, можно ли для заданной разрешающей способности экспериментальной установки по энергии различить в спектре РМИ пики от двух атомных компонентов, а также спланировать оптимальные условия проведения эксперимента.

Высокая поверхностная чувствительность метода РМИ связана с тем, что при упругом рассеянии в рассматриваемой области энергий верхний слой атомов сильно "затеняет" второй слой, а также более глубокие слои атомов мишени. Атомы этих слоев оказываются в области с нулевой плотностью потока падающих частиц. В этих условиях рассеяние ионов пучка и формирование полезного сигнала происходят только в верхнем слое. Однако сильное перераспределение пространственной плотности потока падающих частиц может приводить к нарушению основного предположения модели, согласно которому взаимодействие ионов с образцом имеет вид одиночных актов рассеяния ионов на атомах поверхности. В частности, в формирование полезного сигнала могут вносить вклад и процессы многократного рассеяния, пример которых показан на рис.3.

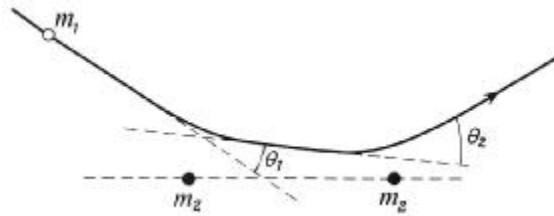


Рисунок 3 – Схематическое изображение двукратного рассеяния налетающего иона на атомах верхнего слоя

Вклад подобных процессов в экспериментальный спектр определяется величиной их сечения, которое зависит от конкретного потенциала взаимодействия иона с атомом поверхности. В [7] было показано, что сечение двукратного рассеяния нельзя представить в виде произведения сечений последовательных одночастичных процессов, и поэтому рассеяние на двух пространственно разделенных атомах мишени необходимо рассматривать как единое событие.

Однократное рассеяние имеет плоский характер, в том смысле, что если через  $\mathbf{n}_{\text{det}}$  обозначить орт оси детектора, то три вектора  $\mathbf{R}_{ia}$ ,  $\mathbf{v}_0$  и  $\mathbf{n}_{\text{det}}$  должны быть компланарными. Именно это обстоятельство и делает возможным (при заданном соотношении масс частиц) установление однозначной связи между энергией упруго рассеянного иона и углом рассеяния. Однако двукратное рассеяние в общем случае не является плоским. Действительно, если  $\mathbf{R}_{a1a2}$  – вектор относительного положения двух атомов мишени, на которых последовательно рассеивается налетающий ион, то четыре вектора  $\mathbf{R}_{ia}$ ,  $\mathbf{v}_0$ ,  $\mathbf{n}_{\text{det}}$  и  $\mathbf{R}_{a1a2}$  могут не принадлежать одной плоскости. Если предположить, что для каждого из двух последовательных столкновений иона с атомами мишени справедливы те же приближения 1) – 3), то для конкретной геометрии двукратного рассеяния энергия рассеянного иона определяется неоднозначно. Однако для заданного направления падения пучка существует большое число возможных расположений первого и второго атомов мишени, таких, что после двукратного рассеяния на них ион попадет в фиксированный детектор. Поэтому распределение энергии двукратно рассеянных частиц будет отличным от нуля в пределах целого интервала, в отличие от однократно рассеянных частиц, для которых аналогичное распределение стягивается в точку  $E_i$ . Ниже показано, что  $E_i$  лежит внутри рассматриваемого интервала, так что энергия двукратно рассеянной частицы может быть как больше, так и меньше энергии частицы после однократного рассеяния на тот же угол.

Рассмотрим вопрос о положении этого интервала в общем случае. Подобный анализ некоторых частных случаев был выполнен ранее. Так, в [8,9] было предложено простое графическое представление зависимости энергии рассеянных ионов  $E_i(\theta_i)$  (2) и атомов отдачи  $E_a(\theta_a)$  (3) от соответствующих угловых переменных. Оно основано на том, что в полярных координатах "угол-скорость" функция (2) определяет окружность, радиус и координаты центра которой зависят лишь от отношения масс  $\mu$  рассматриваемых частиц. То же справедливо и для функции (3). Это графическое представление делает не только очень наглядными зависимости "энергия – угол" для рассеянных частиц и частиц отдачи, но и допускает несколько обобщений. Одно из них состоит в возможности графического сравнения энергий частиц после рассеяния на один и тот же угол в результате одного или двух последовательных столкновений. В [8] показано, что для  $\mu > 1$  частица, упруго рассеявшаяся вначале на угол  $\theta_1$ , а затем – на угол  $\theta_2$ , всегда будет

обладать энергией, большей, чем частица, однократно рассеявшаяся на угол

$$\theta = \theta_1 + \theta_2 . \quad (5)$$

Заметим, что для фиксированного направления пучка и положения детектора (5) справедливо только в случае, когда орбитальные плоскости первого и второго столкновений совпадают. В общем случае соотношение между углами  $\theta_1$ ,  $\theta_2$  и  $\theta$  будет более сложным (рис.4). В каждом отдельном столкновении момент импульса частицы сохраняется, так что ее движение происходит в орбитальной плоскости. Однако *out*-асимптота первого столкновения (отрезок BC на рис.4) является одновременно и *in*-асимптотой второго столкновения, т.е. в общем случае линией пересечения двух орбитальных плоскостей. Поэтому частица при движении переходит из одной плоскости в другую, а ее траектория имеет вид ломаной пространственной линии.

Пусть  $E_1$  – энергия налетающего иона после первого рассеяния на угол  $\theta_1$  на атоме мишени, а  $E_2$  – энергия после второго рассеяния на угол  $\theta_2$ . Если для каждого из двух последовательных столкновений справедливы те же приближения 1) – 3), то

$$E_1 = K(\theta_1; \mu)E_0 , \quad E_2 = K(\theta_2; \mu)E_1 \quad (6)$$

и, следовательно,

$$E_2 = K(\theta_1; \mu)K(\theta_2; \mu)E_0 . \quad (7)$$

Поэтому вопрос о том, какой может быть энергия двукратно рассеянной частицы, сводится к выяснению того, какие значения могут принимать переменные  $\theta_1$  и  $\theta_2$  при условии, что полный угол рассеяния равен  $\theta$ .

Ясно, что переменные  $\theta_1$  и  $\theta_2$  не являются независимыми. В наиболее простом случае, когда орбитальные плоскости первого и второго рассеяния совпадают, налагаемое на них условие связи имеет вид уравнения (5). Для определения вида уравнения введем в рассмотрение прямоугольную декартовую лабораторную систему координат  $Oxyz$  и определим в ней единичные направляющие векторы  $\mathbf{q}_0$  пучка ионов (*in*-асимптоты первого столкновения);  $\mathbf{q}_1$  – *out*-асимптоты первого и одновременно *in*-асимптоты второго столкновения и  $\mathbf{q}_2$  – *out*-асимптоты второго столкновения. Из динамических соображений ясно, что

$$\mathbf{q}_1 = f(\mathbf{q}_0; \theta_1, \mathbf{n}_1) , \quad \mathbf{q}_2 = f(\mathbf{q}_1; \theta_2, \mathbf{n}_2) , \quad (8)$$

где  $\mathbf{n}_1$  и  $\mathbf{n}_2$  – векторы нормали орбитальной плоскости первого и второго рассеяния соответственно, а  $f$  – функция, описывающая преобразование координат единичного вектора при повороте его в заданной орбитальной плоскости на заданный угол. Тогда искомое уравнение связи является следствием уравнения

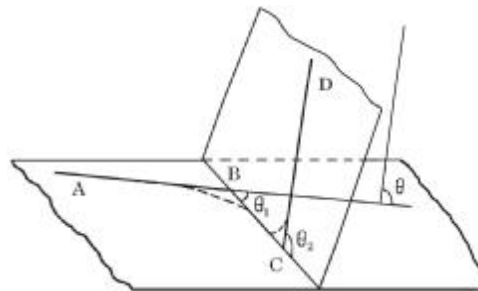
$$f[f(\mathbf{q}_0; \theta_1, \mathbf{n}_1); \theta_2, \mathbf{n}_2] = \mathbf{n}_{\text{det}} \quad (9)$$

при условии, что

$$\mathbf{q}_0 \cdot \mathbf{n}_{\text{det}} = \cos \theta . \quad (10)$$

Для определения вида функции  $f$  на первом шаге введем в рассмотрение вспомогательную прямоугольную декартовую систему

координат  $Ox'y'z'$ , в которой проще всего описывается рассеяние частицы на заданном силовом центре. Пусть  $\mathbf{q}'_0$  – единичный направляющий вектор скорости частицы в системе  $Ox'y'z'$  до рассеяния, а  $\mathbf{q}'_1$  – после рассеяния на угол  $\delta$ . На втором шаге установим связь между системами  $Oxyz$  и  $Ox'y'z'$ , для чего найдем параметры ортогонального преобразования одной системы в другую. Тогда координаты вектора  $\mathbf{q}_1$  скорости частицы после рассеяния в системе  $Oxyz$  получаются из координат вектора  $\mathbf{q}'_1$  по обычным формулам, связывающим координаты одной и той же точки в разных системах.

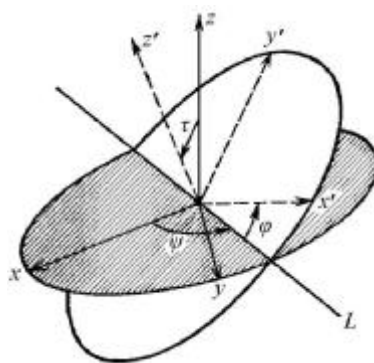


*Рисунок 4 – Схематический вид траектории частицы, последовательно рассеивающейся на двух сферически симметричных центрах:*

*AB и BC – соответственно in- и out-асимптоты первого столкновения, BC и CD – второго столкновения;  $\theta_1$  и  $\theta_2$  – углы рассеяния в первом и втором столкновении соответственно;  $\theta$  – полный угол рассеяния. Пунктиром обозначена истинная траектория частицы*

Совместим один из ортов  $\mathbf{i}'$ ,  $\mathbf{j}'$ ,  $\mathbf{k}'$  (например,  $\mathbf{k}'$ ) системы  $Ox'y'z'$  с вектором скорости частицы до рассеяния (очевидно, тогда  $\mathbf{q}'_1 = (0, 0, 1)$ ), а одну из координатных плоскостей, на пересечении которых лежит орт  $\mathbf{k}'$  (например,  $Ox'z'$ ), – с орбитальной плоскостью. Поскольку результат рассеяния частицы, по сути, состоит в повороте ее вектора скорости в орбитальной плоскости на угол  $\delta$ , то

$$\mathbf{q}'_1 = (\sin \delta, 0, \cos \delta). \quad (11)$$



*Рисунок 5 – Иллюстрация определения углов Эйлера  $\psi$ ,  $\tau$ ,  $\phi$ . L – линия узлов*

В общем случае положение одной системы по отношению к другой, имеющей с ней общее начало, задается  $3 \times 3$  матрицей перехода, т.е. девятью параметрами. Однако поскольку для систем  $Ox'y'z'$  и  $Oxyz$  девять косинусов углов между их осями должны удовлетворять шести условиям ортогональности, то число независимых параметров уменьшается до трех. Очень часто в качестве таких параметров выбирают три угла Эйлера: угол прецессии  $\psi$ , угол нутации  $\tau$  и угол чистого вращения  $\varphi$  (рис.5). При таком выборе преобразование системы  $Oxyz$  в систему  $Ox'y'z'$  можно представить в виде последовательного проведения трех производимых в соответствующих координатных плоскостях поворотов, что позволяет установить следующую связь между координатами  $(x, y, z)$  и  $(x', y', z')$  произвольной точки в этих системах:

$$\begin{aligned} x &= x'(\cos\varphi \cos\psi - \sin\varphi \cos\tau \sin\psi) - y'(\cos\varphi \cos\tau \sin\psi + \sin\varphi \cos\psi) + z' \sin\tau \sin\psi, \\ y &= x'(\cos\varphi \sin\psi + \sin\varphi \cos\tau \cos\psi) + y'(\cos\varphi \cos\tau \cos\psi - \sin\varphi \sin\psi) - z' \sin\tau \cos\psi, \\ z &= x' \sin\varphi \sin\tau + y' \cos\varphi \sin\tau + z' \cos\tau. \end{aligned} \quad (12)$$

Подставив в систему (12) вместо  $(x', y', z')$  координаты (11) вектора  $\mathbf{q}'_1$  скорости частицы после рассеяния в системе  $Ox'y'z'$ , получим координаты этого же вектора в системе  $Oxyz$ , т.е. искомое преобразование  $f$ . Очевидно, что для этого нужно в явном виде определить соответствующие углы Эйлера  $\psi, \tau, \varphi$  (точнее, значения тригонометрических функций  $\sin$  и  $\cos$  этих углов). Представим единичные векторы  $\mathbf{q}_0$  и  $\mathbf{q}_1$  их направляющими косинусами:

$$\mathbf{q}_0 = (\cos\alpha_0, \cos\beta_0, \cos\gamma_0), \quad (13)$$

$$\mathbf{q}_1 = (\cos\alpha_1, \cos\beta_1, \cos\gamma_1), \quad (14)$$

так что

$$\cos^2\alpha_0 + \cos^2\beta_0 + \cos^2\gamma_0 = \cos^2\alpha_1 + \cos^2\beta_1 + \cos^2\gamma_1 = 1. \quad (15)$$

Тогда можно показать, что

$$\sin\psi = \frac{\cos\alpha_0}{\sin\gamma_0}, \quad \cos\psi = -\frac{\cos\beta_0}{\sin\gamma_0}. \quad (16)$$

$$\sin\tau = \sin\gamma_0, \quad \cos\tau = \cos\gamma_0. \quad (17)$$

$$\begin{cases} \sin\varphi = \frac{1}{n} \frac{R_z - G \cos\gamma_0}{\sin\gamma_0}, \\ \cos\varphi = \frac{1}{n} \left( -R_x \frac{\cos\beta_0}{\sin\gamma_0} + R_y \frac{\cos\alpha_0}{\sin\gamma_0} \right), \end{cases} \quad (18)$$

где  $\mathbf{R}_{ia} = (R_x, R_y, R_z)$  – вектор относительного положения иона и атома до рассеяния,

$$G = \mathbf{R}_{ia} \cdot \mathbf{q}_0 = R_x \cos\alpha_0 + R_y \cos\beta_0 + R_z \cos\gamma_0,$$

$n$  – модуль нормального вектора  $\mathbf{n}$  орбитальной плоскости



$$\mathbf{n} = \mathbf{q}_0 \times \mathbf{R}_{ia} = \begin{vmatrix} \mathbf{i} & \mathbf{j} & \mathbf{k} \\ \cos \alpha_0 & \cos \beta_0 & \cos \gamma_0 \\ R_x & R_y & R_z \end{vmatrix},$$

а  $\mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{k}$  – орты системы  $Oxyz$ .

Выбор системы  $Ox'y'z'$  зависит как от налетающего иона, так и от первоначально неподвижного атома, а система соотношений (16) – (18) конкретизирует параметры, определяющие такой выбор. Однако в дальнейшем столь детальная информация не потребуется. Из рис. 5 видно, что если в заданной системе координат  $Oxyz$  зафиксировать вектор скорости  $\mathbf{q}_0$  частицы до рассеяния, то тем самым будет зафиксировано положение показанных на рисунке плоскостей, а следовательно, и линии их пересечения (линии узлов  $L$ ). Таким образом, выбор вектора  $\mathbf{q}_0$  фиксирует углы  $\psi$  и  $\tau$ . Орбитальная плоскость  $Ox'z'$  принадлежит пучку плоскостей с центром в  $\mathbf{q}_0$  и однозначно определяется координатами лежащего в ней первоначально неподвижного атома. Если нас интересует не расчет результата конкретного акта рассеяния, а решение оптимизационной задачи, то нужно рассматривать все возможные положения атома. Из рис. 5 видно, что для этого необходимо считать, что угол чистого вращения  $\varphi$  может принимать любые значения из интервала  $[0, 2\pi]$ .

С учетом последнего замечания, подставляя в систему соотношений (12) выражения (16), (17) для углов Эйлера  $\psi$  и  $\tau$ , вместо  $(x', y', z')$  – координаты (11) вектора  $\mathbf{q}'_1$ , а вместо  $(x, y, z)$  – координаты (14) этого же вектора в системе  $Oxyz$ , получим:

$$\begin{aligned} \cos \alpha_1 &= \cos \delta \cos \alpha_0 - \frac{\sin \delta}{\sin \gamma_0} (\sin \varphi \cos \gamma_0 \cos \alpha_0 + \cos \varphi \cos \beta_0), \\ \cos \beta_1 &= \cos \delta \cos \beta_0 - \frac{\sin \delta}{\sin \gamma_0} (\sin \varphi \cos \gamma_0 \cos \beta_0 - \cos \varphi \cos \alpha_0), \\ \cos \gamma_1 &= \cos \delta \cos \gamma_0 + \sin \delta \sin \varphi \sin \gamma_0. \end{aligned} \quad (19)$$

В литературе можно найти много форм подобных соотношений. Все они, по-видимому, могут быть выведены в рамках описанной выше схемы, в основе которой лежит связь между системами  $Oxyz$  и  $Ox'y'z'$ . При этом следует иметь в виду, что матрица, описывающая собственное вращение в трехмерном евклидовом пространстве, может быть различными способами представлена в виде произведения трех матриц. Так, существует шесть способов, которыми эту матрицу можно выразить в виде произведения вращений вокруг двух различных осей координат. Кроме того, существует шесть способов представления матрицы вращений в виде произведения вращений вокруг трех различных осей координат. И без того большой набор, состоящий из 12 систем углов Эйлера, еще увеличивается из-за того, что некоторые из углов Эйлера можно брать с обратным знаком, а также пользоваться левыми системами координат. Кроме того, очевидно, что орбитальная плоскость может быть совмещена с любой из трех координатных плоскостей системы  $Ox'y'z'$ . Все это приводит к большому разнообразию конкретных форм преобразования  $f$ .

С этой точки зрения прежде чем пользоваться подобным преобразованием, целесообразно убедиться, что оно удовлетворяет ряду тестов, справедливость которых не зависит от способа определения углов Эйлера или порядка нумерации осей:

– в отсутствие рассеяния ( $\delta = 0$ ) направление движения частицы должно оставаться неизменным, т.е. должно быть  $\alpha_1 = \alpha_0, \beta_1 = \beta_0, \gamma_1 = \gamma_0$ ;  
 – скалярное произведение векторов  $\mathbf{q}_0$  и  $\mathbf{q}_1$  должно быть равно косинусу угла рассеяния, т.е.

$$\mathbf{q}_0 \cdot \mathbf{q}_1 = \cos \alpha_0 \cos \alpha_1 + \cos \beta_0 \cos \beta_1 + \cos \gamma_0 \cos \gamma_1 = \cos \delta;$$

– сумма квадратов направляющих косинусов вектора  $\mathbf{q}_1$  должна быть равна единице, т.е.  $\cos^2 \alpha_1 + \cos^2 \beta_1 + \cos^2 \gamma_1 = 1$ ;

– при рассеянии частица должна все время оставаться в орбитальной плоскости, т.е.  $\mathbf{q}_0 \cdot \mathbf{n} = \mathbf{q}_1 \cdot \mathbf{n} = 0$ .

С помощью достаточно простых преобразований можно убедиться в том, что система (19) удовлетворяет всем тестам 1) – 4). При проверке четвертого теста удобно использовать мнемонические правила Непера для решения прямоугольного сферического треугольника. В то же время аналогичная система (7.5.5) в [9] не удовлетворяют тесту 2) и, по-видимому, содержит опечатку.

### 3 ОБОБЩЕНИЕ НА СЛУЧАЙ ДВУХ ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНЫХ СТОЛКНОВЕНИЙ

Применим найденное преобразование  $f$  к двум последовательным рассеяниям иона на атомах мишени – первому на угол  $\theta_1$  в орбитальной плоскости, задаваемой углом  $\varphi_1$ , и второму – на угол  $\theta_2$  в орбитальной плоскости, задаваемой углом  $\varphi_2$ :

$$\begin{aligned} \cos \alpha_1 &= \cos \theta_1 \cos \alpha_0 - \frac{\sin \theta_1}{\sin \gamma_0} (\sin \varphi_1 \cos \gamma_0 \cos \alpha_0 + \cos \varphi_1 \cos \beta_0), \\ \cos \beta_1 &= \cos \theta_1 \cos \beta_0 - \frac{\sin \theta_1}{\sin \gamma_0} (\sin \varphi_1 \cos \gamma_0 \cos \beta_0 - \cos \varphi_1 \cos \alpha_0), \end{aligned} \quad (20)$$

$$\cos \gamma_1 = \cos \theta_1 \cos \gamma_0 + \sin \theta_1 \sin \varphi_1 \sin \gamma_0.$$

$$\begin{aligned} \cos \alpha_2 &= \cos \theta_2 \cos \alpha_1 - \frac{\sin \theta_2}{\sin \gamma_1} (\sin \varphi_2 \cos \gamma_1 \cos \alpha_1 + \cos \varphi_2 \cos \beta_1), \\ \cos \beta_2 &= \cos \theta_2 \cos \beta_1 - \frac{\sin \theta_2}{\sin \gamma_1} (\sin \varphi_2 \cos \gamma_1 \cos \beta_1 - \cos \varphi_2 \cos \alpha_1), \end{aligned} \quad (21)$$

$$\cos \gamma_2 = \cos \theta_2 \cos \gamma_1 + \sin \theta_2 \sin \varphi_2 \sin \gamma_1.$$

Перемножая эти преобразования (подставляя выражения для  $\alpha_1, \beta_1, \gamma_1$  из (20) в (21)) и приравнивая вектор  $\mathbf{q}_2 = (\cos \alpha_2, \cos \beta_2, \cos \gamma_2)$  вектору  $\mathbf{n}_{\text{det}} = (\cos \alpha_{\text{det}}, \cos \beta_{\text{det}}, \cos \gamma_{\text{det}})$ , получим конкретную форму уравнения (9). Последнее будет представлять систему из трех нелинейных уравнений относительно четырех неизвестных  $\theta_1, \varphi_1; \theta_2, \varphi_2$ , которая должна быть решена с учетом уравнения связи (10).

Проще всего вопрос о существовании и единственности решения системы уравнений (9), а также о соотношениях между неизвестными можно решить на основе физических соображений. В случае единственного рассеяния для заданных векторов  $\mathbf{q}_0$  и  $\mathbf{q}_1$  всегда можно так выбрать углы  $\theta_1, \varphi_1$ , что рассеянная частица попадет в детектор, характеризуемый вектором  $\mathbf{q}_1$ . Для этого достаточно в качестве орбитальной плоскости взять ту плоскость пучка с центром в  $\mathbf{q}_0$ , которая

параллельна вектору  $\mathbf{q}_1$ , и положить  $\theta_1 = \arccos(\mathbf{q}_0 \cdot \mathbf{q}_1)$ . Таким образом, система преобразований (20), рассматриваемая как система из трех нелинейных уравнений относительно  $\theta_1, \varphi_1$ , имеет решение для любых  $\mathbf{q}_0$  и  $\mathbf{q}_1$  и притом – единственное. Аналогичное утверждение справедливо, конечно, и для рассматриваемой по отдельности системы (21).

В случае *двукратного рассеяния* системы (20) и (21) необходимо рассматривать совместно. При этом вектор  $\mathbf{q}_0$  фиксирован, поскольку он определяется падающим пучком, вектор  $\mathbf{q}_2$  также фиксирован и равен  $\mathbf{n}_{\text{det}}$ , однако вектор  $\mathbf{q}_1$  может быть любым. Для произвольного вектора  $\mathbf{q}_1$  из системы (20) однозначным образом определяются переменные  $\theta_1, \varphi_1$ , а из системы (21) – переменные  $\theta_2, \varphi_2$ . Таким образом, при любом определяемом из уравнения (10) параметре  $\theta$  система нелинейных уравнений (9) совместна, но не определена. Это обстоятельство и является причиной того, что для заданного полного угла рассеяния  $\theta$  энергии (7) двукратно рассеянных частиц заполняют конечный интервал.

Для произвольных переменных  $\theta_1, \varphi_1$  система (20) однозначно определяет вектор  $\mathbf{q}_1$ , а для этого же вектора система (21) – переменные  $\theta_2, \varphi_2$ . Это значит, что  $\theta_2, \varphi_2$  являются однозначными функциями  $\theta_1, \varphi_1$ :

$$\begin{cases} \theta_2 = f_\theta(\theta_1, \varphi_1; \theta), \\ \varphi_2 = f_\varphi(\theta_1, \varphi_1; \theta), \end{cases} \quad (22)$$

в которые полный угол рассеяния входит как параметр. Из обратимости по времени классических уравнений движения следует, что отображение (22) биективно, т.е.  $\theta_1, \varphi_1$  – это также однозначные функции  $\theta_2, \varphi_2$ . Таким образом, в системе нелинейных уравнений (9) из четырех неизвестных  $\theta_1, \varphi_1; \theta_2, \varphi_2$  независимыми являются лишь два, например,  $\theta_1, \varphi_1$ . Следовательно, энергию (7) двукратно рассеянной частицы можно представить в виде

$$E_2 = K(\theta; \mu) K(f_\theta(\theta_1, \varphi_1; \theta); \mu) E_0 = \tilde{K}(\theta_1, \varphi_1; \mu, \theta) E_0, \quad (23)$$

и вопрос об определении ее наименьшего и наибольшего значений сводится к задаче поиска экстремумов функции  $\tilde{K}(\theta_1, \varphi_1; \mu, \theta)$  – обобщенного кинематического множителя – для заданных параметров  $\mu$  и  $\theta$ .

Для решения этой оптимизационной задачи необходим явный вид функции  $f_\theta$ , точнее говоря, достаточно установить вид этой функции в какой-то одной системе координат  $Oxyz$ , поскольку величина экстремумов функции  $\tilde{K}$  от выбора системы  $Oxyz$  не зависит. Попробуем найти такую ориентацию осей  $Oxyz$ , для которой система уравнений (9) принимает наиболее простой вид. Для этого на первом шаге ось  $Ox$  направим параллельно вектору  $\mathbf{q}_0$ , а плоскость  $Oxy$  – параллельно вектору  $\mathbf{n}_{\text{det}}$ . Очевидно, что при этом  $\mathbf{q}_0 = (1, 0, 0)$ ,  $\mathbf{n}_{\text{det}} = (\cos\theta, \sin\theta, 0)$  и система уравнений (9) в форме (20), (21) принимает вид:

$$\begin{aligned} \cos\alpha_1 &= \cos\theta_1 - \sin\theta_1 \sin\varphi_1, \\ \cos\beta_1 &= \sin\theta_1 \cos\varphi_1, \\ \cos\gamma_1 &= \sin\theta_1 \sin\varphi_1. \end{aligned} \quad (20')$$

$$\begin{aligned}\cos\theta &= \cos\theta_2 \cos\alpha_1 - \frac{\sin\theta_2}{\sin\gamma_1}(\sin\varphi_2 \cos\gamma_1 \cos\alpha_1 + \cos\varphi_2 \cos\beta_1), \\ \sin\theta &= \cos\theta_2 \cos\beta_1 - \frac{\sin\theta_2}{\sin\gamma_1}(\sin\varphi_2 \cos\gamma_1 \cos\beta_1 - \cos\varphi_2 \cos\alpha_1), \quad (21') \\ 0 &= \cos\theta_2 \cos\gamma_1 + \sin\theta_2 \sin\varphi_2 \sin\gamma_1.\end{aligned}$$

Попытка подставить выражения для  $\alpha_1, \beta_1, \gamma_1$  из (20') в (21') приведет к слишком сложным конечным выражениям. Поэтому на втором шаге «перенесем» формально зависимость от угла  $\varphi_1$  с вектора  $\mathbf{q}_1$  на вектор  $\mathbf{n}_{\text{det}}$ . Для этого повернем систему координат первого шага вокруг оси  $Ox$  в положительном направлении на угол  $\varphi_1$ , иначе говоря, совместим координатные плоскости  $Oxy$  и  $Ox'z'$ . При этом координаты вектора  $\mathbf{n}_{\text{det}} = (\cos\theta, \sin\theta, 0)$  необходимо преобразовать по формулам плоского поворота на угол  $\varphi_1$ , а угол  $\varphi_1$  в системе (20') положить равным нулю. В результате:

$$\begin{aligned}\cos\alpha_1 &= \cos\theta_1, \\ \cos\beta_1 &= \sin\theta_1, \quad (20'') \\ \cos\gamma_1 &= 0.\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\cos\theta &= \cos\theta_2 \cos\alpha_1 - \frac{\sin\theta_2}{\sin\gamma_1}(\sin\varphi_2 \cos\gamma_1 \cos\alpha_1 + \cos\varphi_2 \cos\beta_1), \\ \sin\theta \cos\varphi_1 &= \cos\theta_2 \cos\beta_1 - \frac{\sin\theta_2}{\sin\gamma_1}(\sin\varphi_2 \cos\gamma_1 \cos\beta_1 - \cos\varphi_2 \cos\alpha_1), \quad (21'') \\ -\sin\theta \sin\varphi_1 &= \cos\theta_2 \cos\gamma_1 + \sin\theta_2 \sin\varphi_2 \sin\gamma_1.\end{aligned}$$

Подставляя выражения для  $\alpha_1, \beta_1, \gamma_1$  из (20'') в (21''), придем к окончательной форме уравнения (9) в рассматриваемой лабораторной системе координат:

$$\begin{aligned}\cos\theta &= \cos\theta_1 \cos\theta_2 - \sin\theta_1 \sin\theta_2 \cos\varphi_2, \\ \sin\theta \cos\varphi_1 &= \sin\theta_1 \cos\theta_2 + \cos\theta_1 \sin\theta_2 \cos\varphi_2, \quad (24) \\ -\sin\theta \sin\varphi_1 &= \sin\theta_2 \sin\varphi_2,\end{aligned}$$

из которой непосредственно вытекает следующая конкретная форма системы (22):

$$\begin{cases} \cos\theta_2 = \cos\theta \cos\theta_1 + \sin\theta \sin\theta_1 \cos\varphi_1, \\ \sin\varphi_2 = -\frac{\sin\theta \sin\varphi_1}{\sqrt{1 - (\cos\theta \cos\theta_1 + \sin\theta \sin\theta_1 \cos\varphi_1)^2}}. \end{cases} \quad (25)$$

Подставив первое из уравнений системы (25) в левую часть уравнения (23), получим выражение для обобщенного кинематического множителя

$$\tilde{K}(\theta_1, \varphi_1; \mu, \theta) = \frac{1}{(1 + \mu)^4} \left[ \cos \theta_1 + \sqrt{\mu^2 - \sin^2 \theta_1} \right]^2 \times \\ \times \left[ (\cos \theta \cos \theta_1 + \sin \theta \sin \theta_1 \cos \varphi_1) + \sqrt{\mu^2 - [1 - (\cos \theta \cos \theta_1 + \sin \theta \sin \theta_1 \cos \varphi_1)^2]} \right]^2. \quad (26)$$

Очевидно, что

$$0 \leq \tilde{K}_{\min}(\mu, \theta) \leq \tilde{K}(\theta_1, \varphi_1; \mu, \theta) \leq \tilde{K}_{\max}(\mu, \theta) \leq 1. \quad (27)$$

Для определения граничных значений обобщенного кинематического множителя, т.е. функций  $\tilde{K}_{\min}(\mu, \theta)$  и  $\tilde{K}_{\max}(\mu, \theta)$ , необходимо при заданных значениях параметров  $\mu$  и  $\theta$  решить задачу условной оптимизации функции  $\tilde{K}(\theta_1, \varphi_1; \mu, \theta)$  двух переменных  $\theta_1, \varphi_1$ . На эти переменные следует наложить очевидные ограничения типа линейных неравенств:  $0 \leq \theta_1 \leq \pi$  и  $0 \leq \varphi_1 \leq 2\pi$ . Существует множество численных методов решения таких задач [10], которые отличаются друг от друга, в частности, порядком используемых производных целевой функции. При этом увеличение порядка метода, как правило, приводит к повышению его эффективности, и это обстоятельство часто является решающим при выборе метода для множества задач. Однако в рассматриваемом случае размерность пространства поиска невелика (она равна двум), область допустимых значений переменных имеет конечный объем и простую форму, а для целевой функции существует сравнительно простое аналитическое выражение (26). В этих условиях эффективность метода не является критичной, и для отыскания экстремумов обобщенного кинематического множителя можно применить методы прямого поиска, в которых используются значения только целевой функции.

В последнее время наблюдается возрождение интереса к этим методам, поскольку с их помощью удается решать очень трудные оптимизационные задачи, в которых целевая функция может иметь множество локальных минимумов, быть разрывной; независимые переменные могут измеряться в разных шкалах, в том числе и в категориальных, а для таких переменных производные вообще не определены и т.д. Методы прямого поиска находят широкое применение в разных областях, в том числе и при обработке данных в методах анализа поверхности [11].

Мы использовали наиболее простой вариант прямого поиска – метод сплошного перебора, который автоматически учитывает ограничения рассматриваемой задачи и гарантирует, что найденное с его помощью решение будет глобальным. Полученные при этом результаты – зависимость от полного угла рассеяния  $\theta$  функций  $\tilde{K}_{\min}$  и  $\tilde{K}_{\max}$  для двух значений  $\mu$ , которая показана на рис.6.

Из рисунка видно, что энергия дважды рассеянной частицы  $E_d(\theta)$  может быть как больше, так и меньше энергии  $E_s(\theta)$  аналогичной частицы после однократного рассеяния на тот же угол (см. рис.2). Исключением является два значения полного угла рассеяния:  $\theta = 0$  и  $\theta = \pi$ . В первом случае  $E_d(0) \leq E_s(0)$ , а во втором  $E_d(\pi) = E_s(\pi)$ . Из (2) легко видеть, что при однократном рассеянии частицы на угол  $\theta = 0$  ее энергия (и импульс) остаются неизменными, что, по сути, означает отсутствие взаимодействия. Поэтому  $K(0) \equiv 1$  для любого соотношения масс  $\mu$  "сталкивающихся" частиц.

Формально это представление можно перенести и на случай двукратного рассеяния, а поскольку при  $\theta_1 = \theta_2 = 0$  и полный угол

рассеяния также равен нулю, то  $\tilde{K}_{\max}(0) \equiv 0$  для всех значений  $\mu$ . Однако система (25) для  $\theta = 0$  обладает множеством и нетривиальных решений, связанных условием  $\cos\theta_2 = \cos\theta_1$ , т.е.  $\theta_2 = \pm \theta_1$ . Легко видеть, что при выполнении этого условия полный угол рассеяния действительно может быть равен нулю, однако в отличие от однократного рассеяния падающая частица продолжает движение в первоначальном направлении после двух реальных столкновений, в каждом из которых ее энергия уменьшается в  $K(\theta_1)$  раз, так что  $\tilde{K}(0) = K^2(\theta_1)$ . Из рис.2 можно видеть, что для любого  $\mu$  функция  $K(\theta)$  имеет минимальное значение при  $\theta = \pi$ , и поэтому  $\tilde{K}_{\min}(0) = K^2(\pi)$ . С учетом этого можно следующим образом уточнить соотношение (27)

$$K^2(\pi; \mu) \leq \tilde{K}(\theta_1, \varphi_1; \mu, \theta) \leq 1. \quad (28)$$

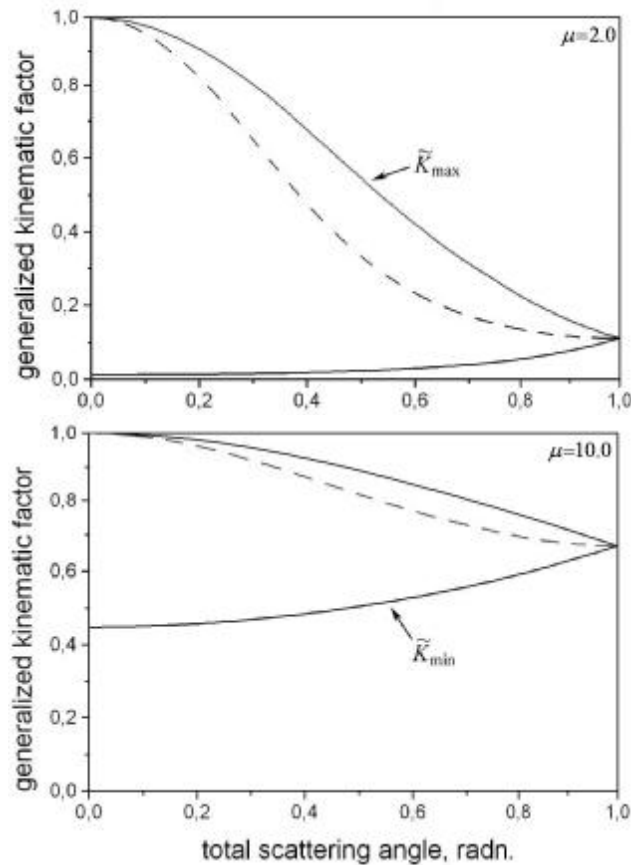


Рисунок 6 – Зависимость граничных значений обобщенного кинематического множителя от полного угла рассеяния для двух  $\mu$  – отношений масс иона и атомов мишени. Для сравнения пунктиром показан график обычного кинематического множителя (2)

#### 4 ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе получено преобразование скорости частицы в результате двух последовательных упругих столкновений с первоначально неподвижными рассеивающими центрами. На основе анализа этого преобразования

показано, что существует множество возможных процессов двукратного рассеяния, приводящих к регистрации частицы в фиксированном детекторе. Таким образом, в общем виде установлено, что двукратно рассеянные частицы на энергетической оси будут заполнять конечный интервал. Показано, что для заданной геометрии эксперимента между характеристиками отдельных актов рассеяния существует функциональная зависимость, и для конкретного выбора лабораторной системы отсчета получена явная форма этой зависимости. Это позволило сформулировать и решить оптимизационную задачу по определению экстремальных значений обобщенного кинематического множителя.

Полученные результаты позволяют утверждать, что ионы пучка, испытавшие двукратное рассеяние на атоме мишени данного типа, будут давать ненулевой вклад в сигнал спектра РМИ в пределах определенного конечного энергетического интервала вблизи сигнала, формируемого в результате однократного рассеяния на атомах того же типа. Качественная картина сохранится и при повышении энергии исходного пучка. При этом метод анализа теряет поверхностную чувствительность, однако у экспериментатора появляется возможность определения профиля распределения элементов по глубине (метод резерфордовского обратного рассеяния (РОР)). Проведенный анализ позволяет, в частности, определить положение высокоэнергетической границы спектра. При этом как в методе РМИ, так и в методе РОР точная форма сигнала, формируемого двукратно рассеянными ионами, будет определяться сечением этого процесса, и можно ожидать, что в некоторых случаях вклад этого процесса в полный спектр рассеянных ионов может быть достаточно велик.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Гурвин С. Квантовый эффект Холла: необычные возбуждения и нарушенные симметрии. – М.-Ижевск: Институт компьютерных исследований, 2003. – 56 с.
2. Романовский Б.В. Современный катализ: наука или искусство? // Соросовский образовательный журнал. – 2000.- № 9. – С.43-48.
3. Гусев А.И. Наноматериалы, наноструктуры, нанотехнологии. – М.: Физматлит, 2005. – 416 с.
4. Chu W.-K., Mayer J., Nicolet M.-A. Backscattering Spectrometry. – New York: Academic Press, 1981. – 364 p.
5. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Механика. – М.: Физматлит, 2001. – 224 с.
6. Вудраф Д., Делчар Т. Современные методы исследования поверхности. – М.: Мир, 1989. – 564 с.
7. Кульментьев А.И. Теоретическое описание процессов многократного рассеяния в методах анализа на пучках заряженных частиц // Вісник СумДУ. – 2006. - № 9 (93). – С.108-119.
8. Eckstein W., Bastasz R. A simple representation for the angular dependence of scattered and recoil particle energies // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. – 1988. – V.B29. – P. 603-608.
9. Экштайн В. Компьютерное моделирование взаимодействия частиц с поверхностью твердого тела. – М.: Мир, 1995. – 321с.
10. Измаилов А.Ф., Солодов М.В. Численные методы оптимизации. – М.: Физматлит, 2005. – 304с.
11. Zhao Z., Meza J.C., Van Hove M. Using pattern search methods for surface structure determination of nanomaterials // J.Phys.: Condens. Matter. -2006. -V.18. – P.8693-8706.

**Кульментьев А.И.**, кандидат физико-математических наук, ведущий научный сотрудник ИПФ НАН Украины, г. Сумы

*Поступила в редакцию 6 апреля 2007 г.*