

Программа позволяет сравнить приближенные решения с точным, если оно известно и задано в файле UTOCHNOE.PAS.

Полученные решения выводятся в виде таблицы. Приближенное решение  $\tilde{y}$  изображается графически.

Работа выполнена во время стажировки в ИММ УрО РАН в отделе аппроксимации и приложений под руководством профессора Черных Н.И. Автор выражает глубокую благодарность Н.И. Черных за постановку задачи, за постоянное внимание и помощь в работе.

### **Библиографический список**

1. Гуляева Л.Е. Применение всплесков к решению неоднородных линейных дифференциальных уравнений с постоянными коэффициентами // Сборник научных трудов. Проблемы электроэнергетики, машиностроения и образования. Вып.2. Изд. РГППУ. Екатеринбург, 2005. С. 7-14.
2. Малла С. Вэйвлеты в обработке сигналов // "Мир", М., 2005.
3. Сансоне Дж. Обыкновенные дифференциальные уравнения, т.1 // Изд. Иностранной литературы, М., 1953.
4. Субботин Ю.Н., Черных Н.И. Всплески в пространствах гармонических функций // Изд. РАН. Серия мат. 2000. Т. 64. № 1. С. 145-174.

**О.И. Ключников, А.В. Степанов,  
М.Г. Нечаева**

### **СПОСОБ ИЗМЕРЕНИЯ ТОЛЩИНЫ ПОВЕРХНОСТНЫХ ПОКРЫТИЙ**

В работе рассматривается способ определения толщины покрытия, находящегося на поверхности образца. В основе способа лежит зависимость интенсивности спектральной линии от угла между поверхностью образца и направлением выхода электронов образца в щель энергоанализатора. Выполненная работа направлена на создание методик, обеспечивающих коррекцию результатов измерений количественного состава материалов в объемах наноразмеров.

Важнейшей задачей по созданию наноматериалов является умение создавать, знать и конструировать свойства поверхности и приповерхностных слоев; прецизионно контролировать структуру; осуществлять качественный и количе-

ственный анализ состава слоев (вплоть до отдельных монослоев); изучать и контролировать физические и химические процессы, протекающие в поверхностных слоях твердых тел и тонких пленках, которые связаны с изменением элементного состава и химического состояния элементов.

Создание научных представлений о свойствах материалов; разработка и внедрение в производство новых материалов и технологий; разработка и совершенствование современных методов измерений и технического контроля структуры и состава тонкослойных систем. Методы РЭС и ЭОС являются методами, предназначенными специально для исследований поверхности с глубокой зондирования порядка нескольких атомных слоев. Количественная РЭС основана на факте прямопропорциональной зависимости эмитированных электронов числу поверхностных атомов. В простейшем случае эта зависимость линейна, но зачастую достаточно сложна.

Информативная глубина образца составляет величину порядка  $(1+10)\text{нм}$ . Интенсивность IАм электронов с j-ой подболочки элемента А от массивного образца, созданных в приповерхностном слое и не потерявших энергию, можно представить формулой.

$$I_A^M = I_x [\sigma(E_{kj})/4\pi] [1 + \beta (3\sin^2\gamma/2 - 1)] \lambda(E_k) \cdot \rho \cdot C_A \cdot k \cdot T \cdot D, \quad (1)$$

где  $I_x$  - интенсивность рентгеновских квантов;  $\sigma(E_k)$  - сечение ионизации j-ой подболочки атома элемента А в образце, состоящим из А,В,С...;  $\beta$  - параметр асимметрии;  $\gamma$  - угол между направлением рентгеновского потока и направлением движения электронов к щели;  $\lambda(E)$  - длина свободного пробега электронов с энергией  $E_k$  в массивном образце;  $\rho$  - объемная плотность однородного по объему образца, состоящего из А,В,С.. элементов (число атомов в одном грамме вещества);  $C_A = \rho_A/\rho$  - молярная концентрация числа атомов А в объеме, занимаемым одним моле атомов образца, состоящем из А,В... компонент  $[C_A$  изменяется от 0 до 1 ( в случае чистого, 100%, вещества из атомов А)];  $k$  - коэффициент затухания электронов, при их движении от точки возбуждения на глубине от поверхности объема.

В большинстве случаев, при нормальных условиях, поверхность образца покрыта пленками окислов (металлы, сплавы); слоем загрязнений (слой углеродородов) и слоем ( или отдельными атомами) адсорбированных атомов и молекул (адсорбатов). Фактически, на поверхности образца, принятой за гомогенную структуру, находится некая слоистая структура, которая образована либо

искусственно (напылением; осаждением); либо из-за естественных условий существования образца в определенной среде( при определенных условиях и существующих энергетических превращениях).

Формализация метода количественного анализа слоистых структур и массивной основы предполагает:

- исследуемый объем имеет микроскопический масштаб по площади (равен размеру рентгеновского пятна) и микроскопически масштаб по глубине(от поверхности вглубь образца), который определяется глубиной выхода электронов и составляет несколько монослоев:

- каждый слой состоит из одного элемента или представляет собой гомогенную смесь нескольких элементов.

Так как информация ограничена объемом испускания (глубиной испускания), то максимальная глубина испускания  $d$  по нормали к поверхности составит

$$d = 3\lambda \sin \theta, \quad (2)$$

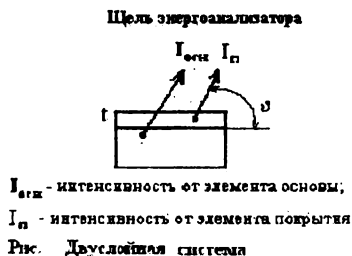
где  $\lambda$  – длина свободного пробега электронов в слое  $d$ ;  $\theta$  -угол между направлением выхода электронов и поверхностью образца (рис.). Информация (регистрируемое число электронов) с такой глубины составляет до 95%. Это ограничение и ввело понятие тонкослойных покрытий, так как при больших величинах покрытий наблюдаемая интенсивность слабо зависит от толщины покрытия и приближается к интенсивности от массивной основы. Таким образом, формула (2) накладывает ограничение на величину определяемого покрытия.

Определение толщины поверхностных загрязнений(например пленка углеводородов) или толщины образовавшегося слоя из элементов исследуемого материала (например, слой окисла) , или толщины нанесенного внешнего покрытия является одной из задач по коррекции результатов количественного анализа.

Таким образом, задача количественного анализа таких образцов сводится: к определению толщины покрытия и коррекции результатов эксперимента. связанных с определением концентрации элементов основы, при наличии покрытий. При наличии покрытий коррекция определения концентрации *элемента основы*, учитывается как ослабление интенсивности элемента в слое покрытия. В практике реализуются два типа покрытий: сплошное покрытие, когда покрытие нанесено на основу в виде сплошного слоя, и неполное покрытие поверхно-

сти (островковый характер покрытия), когда часть поверхности основы остается непокрытой. Далее рассматривается случай сплошного покрытия.

Исследуемая система, состоящая из покрытия (образованного за счет осажденного слоя масла) и основы, рассматривается как двуслойная система, рисунке.



Так, для двуслойных систем, состоящим из материала основы и слоя загрязнений, рис., интенсивность электронов от основы,  $I_{осн}$ , можно описать с помощью уравнения

$$I_{осн} = I_о \cdot [\exp(-t / \lambda_о(E_{ко}) \sin \theta)] \quad (3)$$

а интенсивность от слоя загрязнений (покрытие),  $I_{п}$ , можно записать в виде уравнения

$$I_{п} = I_{оп} \cdot [1 - \exp(-t / \lambda_{п}(E_{кп}) \sin \theta)] \quad (4)$$

где:  $I_{осн}$  и  $I_{п}$  – экспериментальные интенсивности от основы и покрытия;  $t$  – толщина слоя загрязнений;  $\theta$  - угол между поверхностью образца и направлением вылета электронов в щель анализатора;  $\lambda_о(E_{ко})$  – длина пробега электронов с кинетической энергией  $E_{ко}$  выбранного элемента основы в среде слоя загрязнений;  $\lambda_{п}(E_{кп})$  - длина пробега электронов элемента слоя загрязнений с кинетической энергией  $E_{кп}$  в среде этого слоя;  $I_о$  и  $I_{оп}$  - интенсивность от элементов основы и покрытия от отдельного калибровочного элемента (например, от образца без слоя загрязнений -  $I_о$ ; и от образца из углерода- для покрытия -  $I_{оп}$ ).

Из формул(3) и (4) видно, что величина интенсивностей от образца и от покрытия зависит от угла  $\theta$  между плоскостью поверхности образца и направлением вылета электронов в щель энергоанализатора. Кроме того, интенсивности зависят и от угла падения рентгеновского излучения на поверхность образ-

ца (коэффициент учитывающий изменение интенсивности от этого эффекта входит в величины  $I_0$  и  $I_{0p}$ ).

Взаимосвязь между  $I$  и  $\vartheta$  послужила основанием для применения угловой зависимости интенсивности в целях нахождения толщины покрытия  $t$ , величина которой, в дальнейшем, используется для коррекции величины концентрации исследуемого элемента, определяемой по интенсивности этого элемента. При этом нет необходимости в каких-либо дополнительных операциях, усложняющих эксперимент.

Независимо от применяемой формулы, для определения  $t$  делают 2 измерения интенсивности одной и той же спектральной линии от выбранного элемента основы ( $I_{oc1}$  и  $I_{oc2}$ ) [например от элемента А, входящего в состав основы образца] или 2 измерения интенсивности  $I_{p1}$  и  $I_{p2}$  линии от элемента входящего в состав покрытия (например,  $C1s$  линия углерода пленки масла, образовавшейся на поверхности образца) при двух углах  $\vartheta$  и  $\vartheta'$ . Изменение  $\vartheta$  на  $\vartheta'$  осуществляют путем поворота образца вокруг своей оси на добавочный угол  $\Delta\vartheta$  (определяемый по лимбу вращающего устройства), т.е.  $\vartheta' = \vartheta + \Delta\vartheta$ . Начальная величина  $\vartheta$  известна из характеристик прибора.

Способ 1. Определение толщины по интенсивности от элемента основы.

Запишем уравнения интенсивностей  $I_{ocn}$  для линии от элемента основы при значениях углов  $\vartheta_1$  и  $\vartheta_2$ . Тогда уравнения примут вид

$$I_{ocn1} = I_0 \cdot [\exp(-t / \lambda_0(E_{ko}) \sin \vartheta_1)] = I_0 \cdot e^{-t / \lambda_0(E_{ko}) \sin \vartheta_1} \quad (5)$$

$$I_{ocn2} = I_0 \cdot [\exp(-t / \lambda_0(E_{ko}) \sin \vartheta_2)] = I_0 \cdot e^{-t / \lambda_0(E_{ko}) \sin \vartheta_2} \quad (6)$$

Разделив первое уравнение на второе, получим

$$(I_{ocn1} / I_{ocn2}) = e^{-t / \lambda_0(E_{ko})(\sin \vartheta_1 - \sin \vartheta_2)} \quad (7)$$

Толщина покрытия определяется после операции логарифмирования

$$t = \ln(I_{ocn1} / I_{ocn2}) \cdot \lambda_0(E_{ko})(\sin \vartheta_2 - \sin \vartheta_1) \quad (8)$$

В целях упрощения вычислений, разложим экспоненту  $e^x$  в ряд, т.е.  $e^x = 1 + x + \dots$  и возьмем первые два члена разложения.

Тогда уравнение (7) можно записать в виде

$$(I_{ocn1} / I_{ocn2}) = (\sin \vartheta_1 / \sin \vartheta_2) \cdot [(t + \lambda_0(E_{ko}) \sin \vartheta_2) / (t + \lambda_0(E_{ko}) \sin \vartheta_1)] \quad (9)$$

Решая относительно  $t$ , получим

$$t = [(I_{ocn2} - I_{ocn1}) \cdot \lambda_0(E_{ko})] / [(I_{ocn1} / \sin \vartheta_1 - I_{ocn2} / \sin \vartheta_2)] \quad (10)$$

Способ 2. Определение толщины по интенсивности от элемента покрытия.

Аналитическое выражение для  $t$  можно получить и через уравнения интенсивности от элемента покрытия.

Запишем уравнение (4) для двух углов

$$I_{n1} = I_{on} \cdot [1 - \exp(-t / \lambda_n(E_{kn}) \sin \vartheta_1)] \quad (9)$$

$$I_{n2} = I_{on} \cdot [1 - \exp(-t / \lambda_n(E_{kn}) \sin \vartheta_2)] \quad (10)$$

Уравнения перепишем в виде

$$(I_{n1} - I_{on}) / I_{on} = - \exp[-t / \lambda_n(E_{kn}) \cdot \sin \vartheta_1] \quad (11)$$

$$(I_{n2} - I_{on}) / I_{on} = - \exp[-t / \lambda_n(E_{kn}) \cdot \sin \vartheta_2] \quad (12)$$

Возьмем отношение

$$(I_{n1} - I_{on}) / (I_{n2} - I_{on}) = \exp[t / \lambda_n(E_{kn})] \cdot [(1 / \sin \vartheta_2) - (1 / \sin \vartheta_1)] \quad (13)$$

Толщина покрытия определяется после операции логарифмирования

$$t = \ln [(I_{n1} - I_{on}) / (I_{n2} - I_{on})] \cdot \lambda_n(E_{kn}) \cdot [\sin \vartheta_1 \cdot \sin \vartheta_2 / (\sin \vartheta_1 - \sin \vartheta_2)] \quad (14)$$

В целях упрощения расчетов, аналогично ранее рассмотренному варианту, если разделить (9) на (10) и разложить экспоненты в ряд, получим

$$1 = t \left( \frac{I_{n1}}{I_{n2} \cdot \lambda_n(E_{kn}) \cdot \sin \vartheta_2} - \frac{1}{\lambda_n(E_{kn}) \cdot \sin \vartheta_1} \right) \quad (15)$$

Решая относительно  $t$ , получим

$$t = \frac{I_{n2} \cdot \lambda_n(E_{kn}) \cdot \sin \vartheta_1 \cdot \sin \vartheta_2}{I_{n1} \sin \vartheta_1 - I_{n2} \sin \vartheta_2} \quad (16)$$

На основании вышеизложенного можно сделать следующее заключение:

- толщину покрытия определяют по уравнениям интенсивности линий для линий элементов основы, или покрытия, согласно их угловой зависимости;
- определение производится без применения дополнительных стандартных образцов;
- определение осуществляется во время проведения самого эксперимента;
- способ определения толщины является одним из элементов изучения скорости осаждения элементов покрытия на поверхность образца.

#### Библиографический список

1. Brundle C.R., Roberts M.W., // Proc.Roy.Soc.(London). 1972. A 331. P.383-385.

2. Fadley C.S., Bergstrom S.A.L. // Phys/Lett. 1971. V.35A, N5. P.375 -378.
3. Fraser W.A., Florino J.V., Deglass W.N., Robertson W.D. // Surf. Sci. 1973. V.36, N3. P.662-664.
4. Henke ., phys.Rev. 1972. V.A6, N1. P.94-97.
5. Madey T.E., Yates J.T., Erickson N.E.// Chem.Phys.Lett. 1973. N19. P.487-489.
6. Manson S.T. // J.Electr.Spectr. 1972. V.1, N.5. P.413 -415.

**А.А. Меленцов**

## О ПРЕДСТАВЛЕНИЯХ КУСОЧНО-ПОЛИНОМИАЛЬНЫХ ФУНКЦИЙ, ЗАДАНЫХ НА ЕДИНИЧНЫХ КВАДРАТЕ И КУБЕ

В работе [1, §1] была рассмотрена задача о представлении кусочно-полиномиальной функции двух переменных, связанной с разбиением единичного квадрата на прямоугольники (см. рис.1) в виде билинейной функции, принадлежащей классу  $G_M$ . Через  $G_M$  было обозначено множество всех билинейных функций вида

$$g_M(x) = \sum_{s=1}^M \varphi_s(x_1) \psi_s(x_2), \quad (1)$$

где  $x = (x_1, x_2)$ ,  $\varphi_s(x_1), \psi_s(x_2) \in L_q[0,1]$ , следовательно

$$G_M \subset L_q(I^2) (I = [0,1]).$$

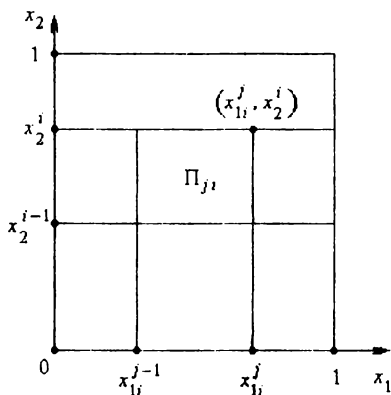


Рис.1