

ОСОБЛИВОСТІ ВИКОРИСТАННЯ МЕТОДУ І ТЕХНІКИ ДОПЛЕРІВСЬКОЇ ТОМОГРАФІЇ ДЛЯ ЗДІЙСНЕННЯ БЕЗЕТАЛОННОГО НАДВИСОКОЧУТЛИВОГО КІЛЬКІСНОГО ЕЛЕМЕНТНОГО АНАЛІЗУ МАТЕРІАЛІВ

Охріменко С.В.

Ужгородський національний університет, 88000, Ужгород, вул. Підгірна 46
E-mail: office@atcu.net

Проведено комп'ютерне моделювання застосування методу і техніки доплерівської томографії з лазерним збудженням для здійснення безеталонного надвисокочутливого кількісного елементного аналізу матеріалів. Визначено оптимальні значення експериментальних параметрів. Встановлено основні закономірності поведінки досліджуваних елементів при проведенні безеталонного надвисокочутливого кількісного елементного аналізу матеріалів. Визначено, що реалізуються лише такі розподіли збуджених в лазерному полі атомів домішки за проєкціями їх швидкостей на нормаль до поверхні, які є монотонно спадаючими функціями швидкості.

Вступ

Одним із чинників сучасного інтересу до емісійних явищ є потреба у створенні кількісних методів діагностики поверхні, які б дозволяли отримувати відомості про її елементний склад, кристалічну структуру, розподіл домішок в приповерхневому шарі тощо. Найактуальнішою вважається проблема створення методу безеталонного високочутливого кількісного елементного аналізу, який би значно прискорив вирішення багатьох практичних задач в різних галузях сучасної науки і техніки, зокрема, в матеріалознавстві, електронному приладобудуванні, мікро- і наноелектроніці та інших.

На теперішній час, з точки зору чутливості аналізу, найбільш перспективними є методи діагностики поверхні іонними пучками. Тобто методи, які базуються на вимірюванні тих чи інших характеристик потоку розпорощених або розсіяних атомних часток. Найбільш відомим з них є вторинна іонна мас спектрометрія (ВІМС) [1-5], в якій аналітична інформація одержується шляхом вимірювання характеристик потоку частинок, розпорощених в іонізованому стані. ВІМС притаманна висока концентраційна чутливість

однак практичне застосування цього методу обмежується необхідністю використання спеціальних пристроїв та полів над поверхнею, що аналізується. Для застосування в технологічних процесах більш перспективними є оптичні методи: іон-фотонна спектроскопія [6], в якій для визначення вмісту мікродомішки аналізують і реєструють оптичне випромінювання збуджених при розпорощенні частинок, і спектроскопія індукованої лазерним випромінюванням флуоресценції (СЛФ) [7], - метод в якому реєструють спонтанне випромінювання, що емітується розпорощеними частинками домішки після їх збудження лазерним випромінюванням. Згадані методи відрізняються дистанційністю відбору інформації, високою точністю ідентифікації елементів, що аналізуються, та малою залежністю аналітичного сигналу від зарядки поверхні.

Загальним недоліком цих і інших методів діагностики поверхні іонними пучками є те, що на даний час вони не дозволяють здійснювати безеталонний кількісний елементний аналіз поверхні, який можливий лише за умови знання імовірності утворення того електронного стану частинок, за яким вони реєструються. Для ме-

тодів, об'єктом дослідження яких є частинки, електронний стан яких формується природно в момент взаємодії з поверхнею, такі імовірності могла б надати теорія формування електронних станів розпорошених та розсіяних частинок. Але на даний момент її стан не дозволяє здійснювати такі розрахунки із перших принципів. Для випадку СЛФ, коли частинки, що аналізуються, штучно збуджують лазерним випромінюванням, спосіб, за допомогою якого одержують експериментальну інформацію, не дає можливості розрахувати згадані імовірності.

Нещодавно був запропонований дослідницький метод доплерівської томографії [8]. Він ґрунтується на вимірюванні диференціальних характеристик потоку збуджених частинок, що емітуються з поверхні під час іонного бомбардування. Його розвиток і апаратурна реалізація відкрили можливості розробки цілого класу надзвичайно інформативних оптичних методів аналізу поверхні іонними пучками, одним з яких є доплерівська томографія з лазерним збудженням частинок (ДТЛЗ) [8], тобто метод, в якому доплерівська томографія поєднується з СЛФ. Він ґрунтується на вимірюванні диференціальних характеристик потоку вторинних атомів, збуджених лазерним випромінюванням із спеціально обраними параметрами, і призначений для проведення безеталонного кількісного елементного аналізу поверхні й об'єму твердих тіл із надвисокою концентраційною чутливістю.

На даний період метод ДТЛЗ є досить відпрацьованим в експериментальному і теоретичному плані: розроблені фізичні основи методу і методика аналізу [9], створено експериментальну установку – доплерівський томограф [10]. Крім того, за розробленими критеріями обрано аналітичні спектральні лінії 50 елементів Періодичної таблиці [11]. Для кожної з них оцінено граничну концентраційну чутливість методу до відповідного елемента в будь-якому матеріалі. При цьому показано, що методу притаманна надзвичайно висока концентраційна чутливість та її відносно слаба залежність від сорту еле-

менту і матеріалу. Показано, що за аналітичними можливостями метод перевищує відомі до тепер аналоги.

Але практичне використання ДТЛЗ для здійснення безеталонного кількісного елементного аналізу поверхні ще потребує оптимізації експериментальних параметрів (потужності лазерного випромінювання, геометрії вимірів тощо). Крім того, слід зазначити, що метод базується на так званому непрямому вимірюванні розподілів розпорошених частинок домішки за швидкостями. Таке вимірювання можна успішно здійснити тільки при наявності якісної і кількісної апріорної інформації щодо згаданих розподілів. Таку інформацію, а також відповідь на запитання про оптимальні експериментальні умови можна одержати за допомогою комп'ютерного моделювання процедури елементного аналізу матеріалів методом ДТЛЗ.

Отже для досягнення мети даної роботи – оптимізації методу ДТЛЗ - необхідно вирішити наступні задачі:

- вибрати оптимальні експериментальні параметри, які б дозволяли забезпечити максимальну чутливість ДТЛЗ в існуючій апаратурній реалізації;

- одержати додаткову інформацію про розподіли збуджених лазерним випромінюванням розпорошених частинок домішки за швидкостями.

Робота складається з трьох частин. Перша містить огляд теоретичних засад методу. Друга – присвячена безпосередньо комп'ютерному моделюванню ДТЛЗ-аналізу. В ній послідовно викладені всі етапи розрахунків, проаналізовані їх результати. Третя частина містить висновки.

Метод ДТЛЗ

Метод полягає у наступному. Реєструють спонтанне оптичне випромінювання, що емітується розпорошеними атомами домішки після їх однофотонного резонансного збудження лазерним випромінюванням із основного стану "0" у певний стан "і". Для збудження використовують перестроюваний лазер неперервної дії з достатньо широкою лінією генерації, яка перекидає доплерівський контур лінії по-

глинання на переході “0” → “i” (останнє необхідно для збудження вторинних атомів домішки у всьому діапазоні їх швидкостей). Крім того, створюють спеціальні умови збудження частинок, а саме, лазерним випромінюванням рівномірно освітлюють паралельний поверхні мішені просторовий шар.

Реєструючи свічення, що емітується атомами домішки на переході “i” → “0”, вимірюють вихід Y_{i0} фотонів на один первинний іон. Нарешті, враховуючи, що коефіцієнт розпорошення атомів домішки в основному стані з високою точністю дорівнює повному коефіцієнту розпорошення домішки S_d , останній знаходять із співвідношення [9]

$$S_d = Y_{i0} / W_{i0}, \quad (1)$$

попередньо визначивши W_{i0} – середнє число фотонів, що випромінюються одним атомом домішки.

Величина

$$W_{i0} = \langle w_{i0}(\mathbf{v}) \rangle, \quad (2)$$

де $w_{i0}(\mathbf{v})$ – імовірність того, що при відльоті від поверхні розпорошений атом домішки, який має швидкість \mathbf{v} і перебуває в основному стані “0”, збудиться на рівень “i” в полі лазерного випромінювання і спонтанно емітує фотон. Кутові дужки у виразі (2) означають усереднення за швидкостями \mathbf{v} .

Вищезазначені умови лазерного збудження надають можливість розрахувати імовірність $w_{i0}(\mathbf{v})$ із перших принципів і, далі, експериментально визначити W_{i0} .

Для дворівневої схеми збудження – де збудження частинок лазерним випромінюванням [11]:

$$w_{i0}(\mathbf{v}) = w_{i0}^{in}(\mathbf{v}) + w_{i0}^{out}(\mathbf{v}), \quad (3)$$

де $w_{i0}^{in}(\mathbf{v})$ і $w_{i0}^{out}(\mathbf{v})$ – імовірності того, що атом спонтанно емітує фотон в межах, та поза межами, освітлюваного лазером просторового шару.

При цьому

$$w_{i0}^{in}(\mathbf{v}) = n_i [h/\tau_i v_z - A^{-1} (1 - \exp(-A h/\tau_i v_z))], \quad (4)$$

$$a \quad w_{i0}^{out}(\mathbf{v}) = n_i [1 - \exp(-A h/\tau_i v_z)], \quad (5)$$

де h – товщина освітлюваного лазером шару, v_z – проекція швидкості \mathbf{v} на нормаль до поверхні зразка, який досліджується, τ_i – час життя атому на збудженому рівні “i” (по відношенню до процесу спонтанного випромінювання), n_i і A – параметри, що визначаються наступними співвідношеннями:

$$n_i = g_i S_k / g_0 A, \quad (6)$$

$$A = 1 + S_k (1 + g_i/g_0), \quad (7)$$

де g_i і g_0 – статистичні ваги рівнів “i” і “0”, S_k – безрозмірний параметр, який називають параметром насичення [7]

$$S_k = P \cdot \lambda^5 / 16 \cdot \pi^2 \cdot h \cdot c^2 \cdot \sigma \cdot \Delta \lambda. \quad (8)$$

Тут P – потужність лазерного випромінювання, λ – довжина хвилі, яка відповідає випромінювальному переходу “i” → “0”, σ – площа перерізу лазерного променя, $\Delta \lambda$ – ширина лазерної лінії.

Як видно з (5), параметр n_i має зміст імовірності збудження атому при його тривалій взаємодії з полем лазерного випромінювання.

Відповідно до (2), враховуючи, що усереднення імовірності $w_{i0}(\mathbf{v})$ за \mathbf{v} зводиться до усереднення імовірності $w_{i0}(v_z)$ за v_z [11], величина W_{i0} є усередненою за v_z імовірністю $w_{i0}(v_z)$, тобто [11]

$$W_{i0} = \frac{\int dv_z f_i(v_z)}{\int dv_z f_i(v_z) / w_{i0}(v_z)}, \quad (9)$$

де інтегрування проводиться по всьому діапазону можливих значень v_z ;

$$f_i(v_z) = f_0(v_z) w_{i0}(v_z), \quad (10)$$

а $f_0(v_z)$ – довільним чином нормований розподіл за v_z атомів домішки, які емітовані в основному стані “0”.

Зрозуміло, що з точністю до постійного множника функція $f_i(v_z)$ може бути представлена вимірним вздовж нормалі до поверхні досліджуваного зразка (та записаним у шкалі швидкостей v_z) доплерівським контуром будь-якої спектральної лінії, яка відповідає спонтанному радіаційному розпаду стану “i” атомів домішки, збуджених лазерним випромінюванням.

Комп'ютерне моделювання ДТЛЗ-аналізу

В якості об'єктів дослідження оберемо Na, Ba, La та Zr, аналітичні лінії яких (обрані в роботі [11]) лежать в межах смуги випромінювання лазера (на барвнику Ро-

дамін 6Ж), який використовується в діючій апаратурі ДТЛЗ.

Атомні константи [12,13], які відповідають аналітичним лініям та від яких залежить W_{i0} наведені в таблиці 1.

Таблиця 1. Атомні константи, які відповідають аналітичним лініям Na, Ba, La та Zr.

№ п/п	Лінія, нм	g_0	g_i	$\tau_i, 10^{-8} \text{ c}$	Маса атому, а.о.м.
1	NaI 5890,0	2	4	1,59	23
2	ZrI 573,6	5	7	580	91
3	BaI 553,5	1	3	1,5	137
4	LaI 550,1	4	6	19	139

Видно, що обрані елементи суттєво різняться за часами життя збуджених рівнів, а також за масами (i , відповідно, за швидкостями відльоту від поверхні). Тому варто очікувати їх різної поведінки при збудженні в полі лазерного випромінювання. Розрахуємо для обраних елементів залежності $w_{i0}^{out}(v_z)$. В розрахунку будемо використовувати типові для діючої апаратури ДТЛЗ значення параметрів лазерного променя (потужність лазерного випромінювання $P = 0.3$ Вт, товщина освітлюваного лазером просторового шару $h = 1$ мм, площа поперечного перерізу променя $\sigma = 10 \text{ мм}^2$, ширина лазерної лінії $\Delta\lambda = 0.2$ нм).

Результати розрахунку наведені на рис. 1. Видно, що для всіх об'єктів залежності $w_{i0}^{out}(v_z)$ мають однаковий характерний вигляд: плато в області малих швидкостей v_z (для Zr це також справедливо, але для надзвичайно малих v_z), яке переходить, із збільшенням v_z , у ділянку монотонного спаду. Область плато відповідає таким швидкостям, при яких імовірність збудження атомів домішки приблизно дорівнює рівноважній імовірності n_i (див. формулу (5)). Останнє, як відзначалось, має зміст імовірності збудження атому домішки, який нескінченно довго знаходиться всередині освітлюваного лазером просторового шару. При досить малих швидкостях атоми домішки за час перетину освітлюваного шару встигають набрати рівноважну імовірність збудження. В області більших швидкостей цього не відбувається, тому на графіках

ся, тому на графіках спостерігається ділянка монотонного спаду величини $w_{i0}^{out}(v_z)$. Ширина області плато залежить лише від часу життя τ_i збуджених рівнів і має швидко звужуватись при збільшенні τ_i . Саме тому ділянки плато для Na і Ba відносно широкі і приблизно однакові (у цих елементів τ_i досить малі і однакові по порядку величини – див. табл.1.). Значно вужчим є плато в La (для нього τ_i на порядок перевищує часи життя збуджених резонансних станів Na і Ba). Нарешті, плато зовсім непомітне в випадку Zr, оскільки час життя збудженого рівня, який відповідає аналітичній лінії ZrI 573,6 нм, є аномально великим.

На рис.2. представлені розраховані нами залежності $w_{i0}(v_z)$ та $w_{i0}^{in}(v_z)$. Видно, що вони теж мають характерний вигляд. Монотонний спад залежностей пояснюється тим, що швидкістю v_z визначається час перебування атому домішки в освітлюваному лазером просторовому шарі, а значить і кількість фотонів, яку частинка спонтанно випромінює зсередини шару. Видно, що зазначені кількості фотонів для всіх елементів, крім Zr, значно перевищують відповідні імовірності $w_{i0}^{out}(v_z)$. Тому шукані залежності $w_{i0}(v_z)$ дуже близькі до залежностей $w_{i0}^{in}(v_z)$. Виключення, яке складає випадок Zr, пояснюється знову ж таки аномально великим часом життя збудженого рівня, який відповідає аналітичній лінії ZrI 573,6 нм.

Розрахуємо для обраних елементів залежність величини W_{i0} від товщини h

освітлюваного лазером просторового шару, спираючись на згадані вище параметри діючої апаратури ДТЛЗ.

З рівнянь (9) та (10) одержуємо:

$$W_{i0} = \frac{\int dv_z f_0(v_z) w_{i0}(v_z)}{\int dv_z f_0(v_z)}, \quad (11)$$

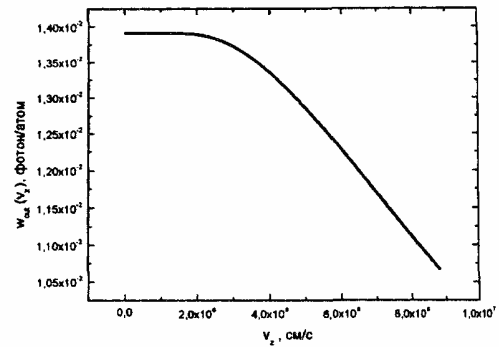
Розподіл $f_0(v_z)$, який фігурує у виразі (11), апроксимуємо відомою формулою Томпсона [14]:

$$f_0(v_z) \sim v_z [(v_z^2 + v_b^2)^{-2(1-m)} - (v_{max}^2 + v_b^2)^{-2(1-m)}], \quad (12)$$

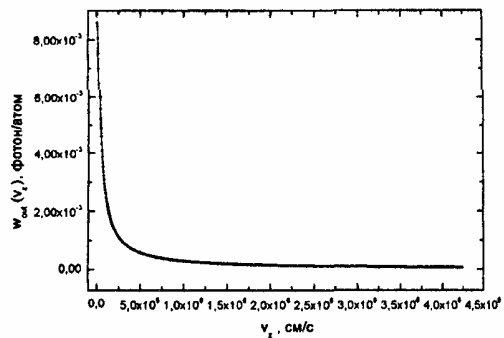
де v_b - швидкість, що відповідає енергії зв'язку E_b атома с поверхнею, v_{max} - максимальна швидкість вторинних атомів, m - параметр формули Томпсона. В якості типового значення v_{max} можна обрати швидкість, яка відповідає швидкості атому домішки після лобового зіткнення з первинним іоном K^+ при енергії останнього 4 кеВ (зондування зразків на діючій апаратурі ДТЛЗ здійснюється іонами K^+ кілоелектроновольтних енергій) [10,15]. Використаємо в (12) характерні значення $m = 0$, $E_b = 3$ еВ.

Результати розрахунку розподілів $f_0(v_z)$ представлені на рис.3. і мають добре відомий вигляд [16]. Максимум цих кривих визначається енергією зв'язку атомів домішки з поверхнею та масою частинки.

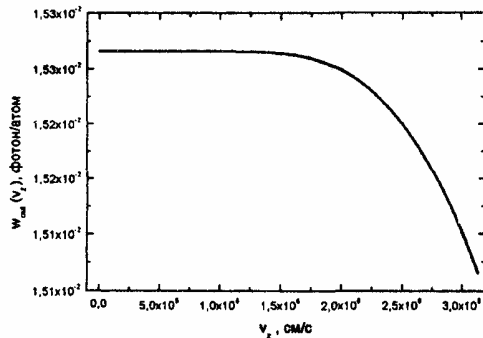
Маючи $f_0(v_z)$ та розрахувавши $w_{i0}(v_z)$ для різних h , можна за формулою (11) розрахувати $W_{i0}(h)$. Одержані таким чином залежності $W_{i0}(h)$ представлені на рис.4. Видно, що для всіх досліджуваних елементів спостерігається вихід на насичення величини $W_{i0}(h)$. Також можна помітити, що у випадках La та особливо Zr, $W_{i0}(h)$ характеризуються малими величинами. Це пояснюється відносно великими часами життя на збудженому рівні, а значить малою імовірністю збудження цих елементів. Ріст залежностей $W_{i0}(h)$ для Na та Ba в області малих h спричиняється тим що з зменшенням h сильно зростає густина потоку лазерного випромінювання, що приводить до зростання долі вимушеного випромінювання фотонів



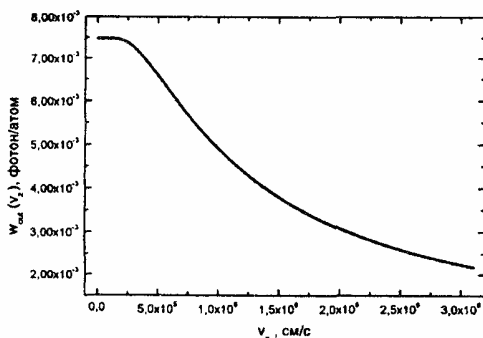
а)



б)

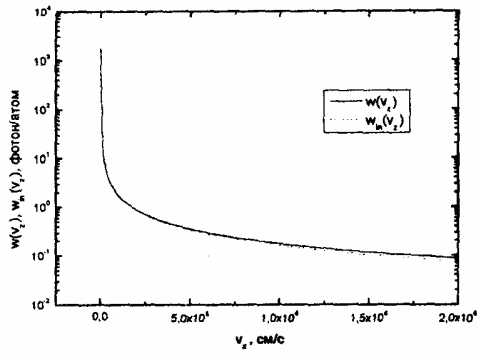


в)

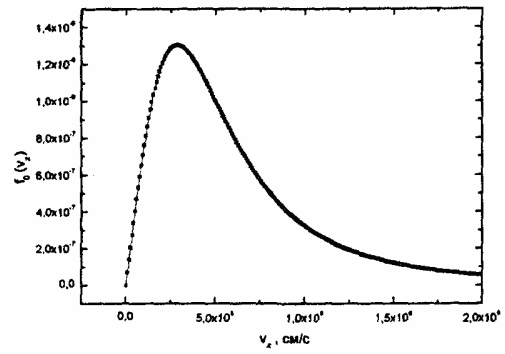


г)

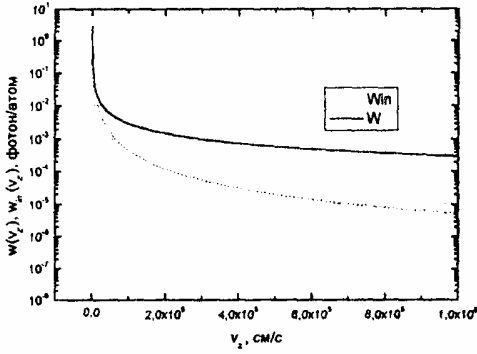
Рис. 1. Імовірність $w_{i0}^{out}(v_z)$ того, що атом, збуджений в освітлюваному лазером просторовому шарі, спонтанно емітує фотон поза його межами для: а) Na; б) Zr; в) Ba; г) La.



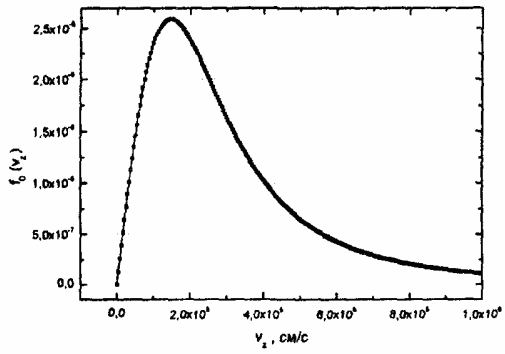
а)



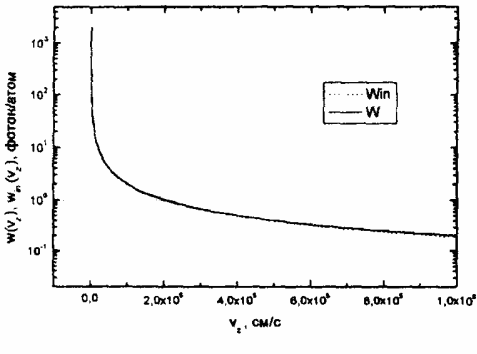
а)



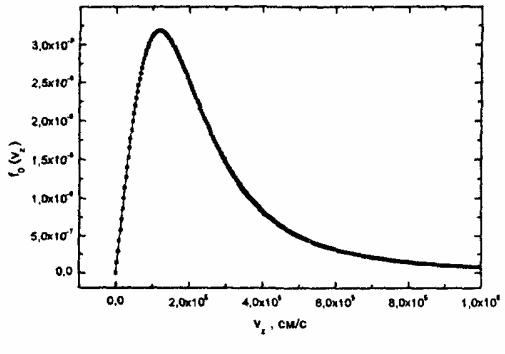
б)



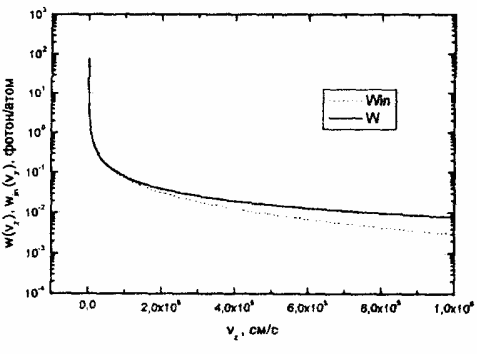
б)



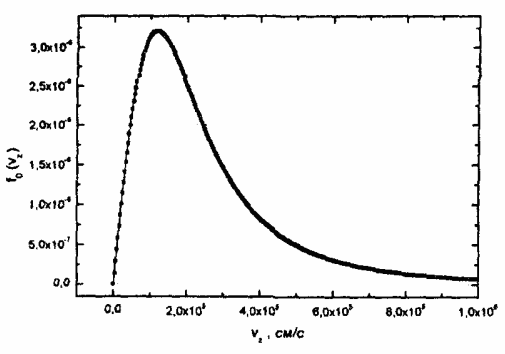
в)



в)



г)



г)

Рис. 2. Імовірність $w_{i0}^{out}(v_z)$ того, що атом, збуджений в освітлюваному лазером просторовому шарі, спонтанно емітує фотон в його межах та загальна імовірність емітування фотону $w_{i0}(v_z)$ для: а) Na; б) Zr; в) Ba; г) La.

Рис. 3. Розподіл $f_0(v_z)$ атомів, емітованих в основному стані за проекціями їх швидкостей на нормаль до поверхні досліджуваного взірця для: а) Na; б) Zr; в) Ba; г) La.

збудженими частинками Na та Ba.

Одержані залежності $W_{i0}(h)$ дозволяють обрати оптимальне для даної реалізації методу значення товщини освітлюваного лазером просторового шару. Єдиним критерієм такого вибору є забезпечення максимальної величини W_{i0} , але при цьому значення h повинне узгоджуватись із ширинами вхідної та вихідної щілин монохроматору і діаметром вхідної діафрагми інтерферометру Фабрі-Перо [15]. З графіків видно, що оптимальними є товщини від 0,25 до 2 мм. Менші значення h не вигідні із-за помітного зменшення величини W_{i0} , а більші – із-за неможливості спостереження за допомогою оптичної системи томографу таких великих об'ємів ореолу. Далі для оцінок будемо вважати $h = 1$ мм, а для всіх інших параметрів використовуватимемо вказані вище типові значення (якщо явно не вказано інше).

На рис. 5. представлено залежності W_{i0} від потужності P лазерного випромінювання. Аналіз залежностей підтверджує, що потужність, яка забезпечується на діючій апаратурі ДТЛЗ достатня для ефективного аналізу обраних для дослідження елементів. Видно, що її доцільно підвищувати до рівня 10 Вт.

Необхідність одержання додаткової апіорної інформації обумовлена тим, що, як згадувалось, за доплерівською методикою (на якій базується метод) безпосередньо вимірюється не розподіл $f_i(v_z)$ збуджених в лазерному полі атомів домішки за проекціями їх швидкостей на нормаль до поверхні, а доплерівський контур $F_{i0}(v_z)$ відповідної аналітичної лінії домішки та апаратна функція $a(v_z)$ системи монохроматор-інтерферометр Фабрі-Перо [15]. Сам розподіл $f_i(v_z)$ одержується за цими даними шляхом розв'язку наступного інтегрального рівняння Фредгольму I роду

$$F_{i0}(v_z) = \int_{-v_T}^{v_T} a(v_z - v'_z) f(v'_z) dv'_z, \quad (12)$$

де v_T – швидкість, яка відповідає половині вільного спектрального інтервалу інтерферометру Фабрі-Перо.

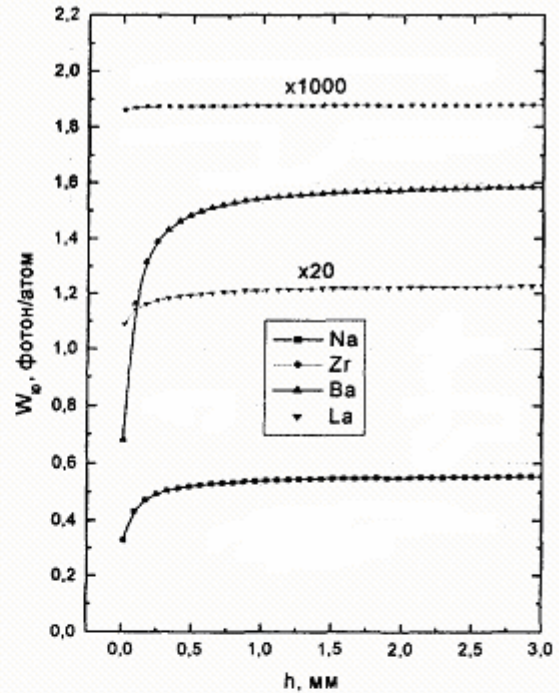


Рис.4. Усереднена за швидкостями атомів домішки імовірність W_{i0} їх лазерного збудження, як функція товщини h освітлюваного лазером просторового шару.

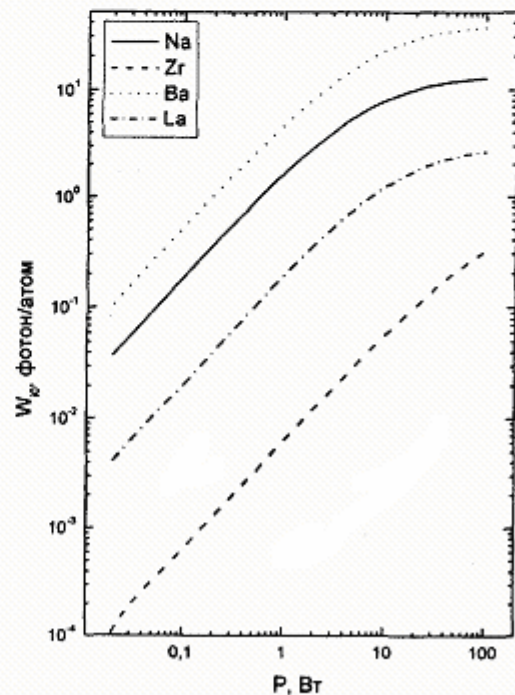
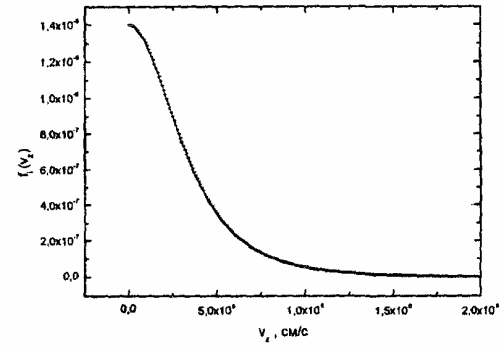


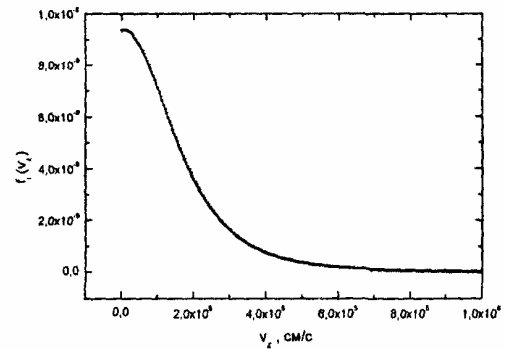
Рис. 5. Залежність усередненої за швидкостями атомів домішки імовірності W_{i0} від потужності P лазерного випромінювання.

Розв'язок цього рівняння складає відому проблему сучасної математики [17,18]. Остання полягає в тому, що шуканий розв'язок неможливо отримати без наявності апріорної інформації про нього. Алгоритм розв'язку та вимоги до точності вимірювання величин $F_{i0}(v_z)$ та $a(v_z)$ визначаються якістю та кількістю апріорної інформації.

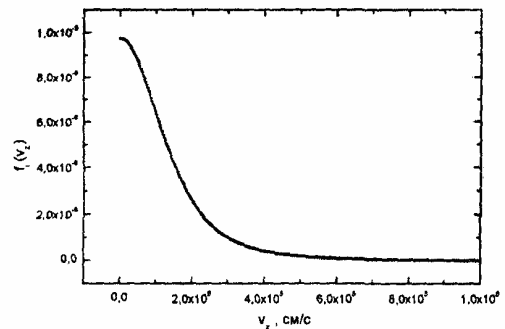
Із загальних міркувань розподіл $f_i(v_z)$ слід вважати гладкою неперервною функцією. В принципі цієї інформації достатньо для розв'язку рівняння (12), але лише при задовольненні жорстких умов щодо точності вимірювання функцій $F_{i0}(v_z)$ та $a(v_z)$ [19]. Тому надзвичайно важливою задачею є пошук додаткової апріорної інформації про розподіли $f_i(v_z)$, оскільки у разі її виявлення можна значно покращити алгоритм розв'язку рівняння (12) та суттєво пом'якшити вимоги до точності вимірювань залежностей $F_{i0}(v_z)$ та $a(v_z)$. Останнє важливо з точки зору практичного використання методу ДТЛЗ, зокрема для здійснення кількісного безеталонного елементного аналізу матеріалів. Пошук такої апріорної інформації здійснимо шляхом надійного комп'ютерного моделювання розподілів $f_i(v_z)$ за формулою (10) для атомів Na, Ba, La та Zr. Результати розрахунку $f_i(v_z)$ представлені на рис. 6. Вони вказують на дві важливі обставини. По-перше, у всіх випадках розподіл $f_i(v_z)$ практично виходить на нуль, починаючи зі швидкості $1 - 2 \cdot 10^6$ см/с. Цим діапазоном і необхідно обмежуватись в розрахунках W_{i0} . Але головною є друга обставина: для всіх чотирьох елементів розподіл $f_i(v_z)$ є монотонно спадаючою функцією швидкості. Це надзвичайно важлива апріорна інформація про шукані розподіли, оскільки вона перетворює некоректну математичну задачу відбудови $f_i(v_z)$ за експериментальними даними про $F_{i0}(v_z)$ та $a(v_z)$ у коректну задачу. Останнє забезпечує високу якість відтворення $f_i(v_z)$ з експериментальних даних. Для розв'язку рівняння (12) з одержаною апріорною інформацією доцільно використовувати метод проєкції спряжених градієнтів з проєкуванням на множину векторів z



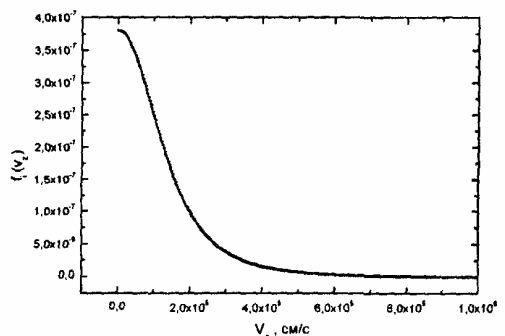
а)



б)



в)



г)

Рис. 6. Розподіл $f_i(v_z)$ збуджених лазером атомів домішки за проєкціями їх швидкостей на нормаль до поверхні досліджуваного візця для: а) Na; б) Zr; в) Ba; г) La.

невід'ємними компонентами [17].

Висновки

В результаті проведеного комп'ютерного моделювання застосування методу і техніки ДТЛЗ для здійснення безеталонного надвисокочутливого кількісного елементного аналізу матеріалів для Na, Ba, La і Zr одержано залежності w_{i0} і W_{i0} (які можна використовувати для визначення вмісту домішок цих елементів в різних матеріалах) від різних експериментальних параметрів. Аналіз розрахованих залежно-стей дозволяє визначити діапазон опти-мальних значень товщини освітлюваного лазером просторового шару над поверх-нею досліджуваного взірця

$h = 0,25 - 2$ мм і встановити, що досягнута на діючій ДТЛЗ апаратурі потужність лазерного випромінювання достатня для виконання високочутливого аналізу.

Аналізом розрахованих $f_i(v_z)$ встановлено, що реалізуються лише такі розподіли збуджених в лазерному полі атомів домішки за проекціями їх швидкостей на нормаль до поверхні, які є монотонно спадаючими функціями v_z . Це дозволяє використовувати метод проекції спряжених градієнтів з проектуванням на множину векторів з невід'ємними компонентами для вирішення задачі одержання $f_i(v_z)$ з $F_{i0}(v_z)$ та $a(v_z)$. Це значно підвищить точність і зменшить час ДТЛЗ – аналізу.

1. Методы анализа поверхности. /Под ред. А. Зандерны. - М.: Мир, 1979. - 584 с.
2. Вудраф Д., Дельтер Т. Современные методы исследования поверхности. - М.: Мир, 1989. - 354 с.
3. Черепин В.Т., Васильев М.А. Методы и приборы для анализа поверхности материалов: справочник. - К.: Наукова думка, 1982. - 399 с.
4. Черепин В.Т. Ионный зонд. – К.: Наукова думка, 1981. - 328 с.
5. Волков С.С., Денисов А.Г., Толстогузов А.Б. Вторичноионные масс-спектрометры. - М.: ЦНИИ "Электроника", 1987. - 61 с.
6. С.С.Поп, С.Ф.Белых, В.Г.Дробнич, В.Х.Ферлегер, Ионно-фотонная эмиссия металлов. - Ташкент, ФАН, 1989. – с.
7. Bay H.L. Laser induced fluorescence as a technique for investigations of sputtering phenomena //Nucl. Instr. & Meth. - 1987. - V.V18. - P.430-445.
8. В.Г.Дробнич, С.С. Поп, В.А.Есаулов, Доплеровская томография потока атомных частиц. - Ужгород, "Закарпаття" 1998. – с.
9. Пат. № 42395А Україна, G01N23/00 Спосіб високочутливого кількісного безеталонного елементного аналізу твердих тіл./ Дробнич Володимир Григорович, Охріменко Сергій Воло-

димирович, Поп Степан Степанович, Шароді Ірина Степанівна (Україна) №2001020979 Заявлено 13.02.2001р. Опубл.: Промислова власність. Офіційний бюл. № 9. 15.10.2002.

10. Пат. № 44612А Україна, G01N23/00 Пристрій для вимірювання тривимірних функцій розподілу по швидкостям атомів і іонів, розпорошених і розсіяних в будь-якому конкретному і-тому електронному стані./ Дробнич Володимир Григорович, Охріменко Сергій Володимирович, Конопльов Олександр Миколайович, Поп Степан Степанович, Шароді Ірина Степанівна (Україна) №2001064025 Заявлено 12.06.2001р. Опубл.: Промислова власність. Офіційний бюл. №2. 15.02.2002.
11. Дробнич В.Г., Охріменко С.В., Поп С.С., Шароді І.С., Конопльов О.М. Оптичний метод кількісного безеталонного елементного аналізу поверхні іонними пучками. //УФЖ, буде опубліковано.
12. Собельман И.И. Введение в теорию атомных спектров. - М.: Наука, 1977. - 319 с.
13. Ч. Корлисс, У. Бозман, Вероятности переходов и силы осцилляторов 70 элементов. – М.: Мир, 1968. – 280с.
14. Thompson M.W. The energy spectrum of ejected atoms during the high energy sputtering //Philos. Mag. - 1968. - V.18. -

- Р.377-414.
15. Дробнич В.Г., Коноплев А.Н., Крицкий В.А., Охрименко С.В. Оптический метод и аппаратура для исследования дифференциальных характеристик распыления и рассеяния //Изв. РАН. Сер.физ. - 1994. - Т.58, №3. - С.26-30.
 16. Фундаментальные и прикладные аспекты распыления твердых тел / Под ред. Е.С.Машковой, М.:Мир, 1989.-350с.
 17. Тихонов А.Н., Гончарский А.В., Степанов В.В., Ягола А.Г. Регуляризующие алгоритмы и априорная информация. М.: Наука, 1983. - 200с.
 18. Верлань А.Ф., Сизиков В.С. Интегральные уравнения: методы, алгоритмы, программы. Справочное пособие. Киев: Наукова думка, 1986, - 543с.
 19. Дробнич В.Г. Дифференциальные характеристики эмиссии возбужденных частиц при ионной бомбардировке металлов: методы, эксперимент, теория // Дис. Доктора физ.-мат. Наук. Ужгород 1999. - 283 с.

PECULIARITIES OF APPLICATION OF DOPPLER TOMOGRAPHY FOR HIGH SENSITIVE STANDARD FREE QUANTITATIVE ELEMENT ANALYSIS OF MATERIALS

Okhrimenko S.V.

Uzhgorod National University, Pidgirma str. 46, Uzhgorod, 88000 Ukraine

E-mail: office@atcu.net

Computer simulation of application of Doppler Tomography with Laser Excitation method for high sensitive standard free quantitative analysis of materials was carried out. Optimal values of experimental conditions were obtained. General regularities of investigated elements behavior during the high sensitive standard free quantitative analysis were determined. It was stated that the only distributions of excited by laser impurity atoms on projections of their velocities on the normal to the surface are distributions, which appears to be monotonously decreasing functions of velocity.