

УДК 535.33

ФИЗИКА

Академик АН КацССР М. И. КОРСУНСКИЙ, Я. Е. ГЕНКИН

**О СООТНОШЕНИИ ИНТЕНСИВНОСТЕЙ ЛИНИЙ В СПЕКТРАХ
МНОГОТИПНЫХ ХАРАКТЕРИСТИЧЕСКИХ ПОТЕРЬ ЭНЕРГИИ
ЭЛЕКТРОНАМИ**

Электронные спектры и, в частности, спектры характеристических потерь энергии электронами (х.п.э.э.) в последнее время играют все большую роль в выяснении электронного строения веществ и их поверхности. Однако расшифровка этих спектров затруднена из-за отсутствия данных о соотношении интенсивностей между различными линиями, особенно в случаях многотипных энергетических потерь, а также данных о функции распределения электронов по пробегам в веществе. Некоторые особенности спектров многотипных х.п.э.э. обсуждены в работах ^(1, 2), в которых получены формулы для интенсивностей отдельных линий спектра с помощью матриц «упругого просеивания», определяющих функцию распределения электронов по пробегам в вещество. Целью настоящей работы является рассмотрение вопроса о соотношении интенсивностей линий в спектрах х.п.э.э. для более широкого класса функций распределения по пробегам электронов в объеме вещества и получение более общих формул и соотношений, необходимых для детального анализа спектров. Дифракционные эффекты не учитываются.

Заметим, что функция распределения по пробегам в общем случае зависит от экспериментальных условий, включающих как энергию падающих на образец электронов, так и условия прохождения электронов от источника через образец к регистрирующему прибору. Физический смысл этой функции $f(\mu_i, l)$ состоит в том, что она представляет собой плотность вероятности прохождения частицей пути в веществе, лежащего между l и $l+dl$ и попадания этой частицы в детектор.

Условие нормировки этой функции имеет вид

$$\int_0^{\infty} f(\mu_i, l) dl = 1, \quad (1)$$

где μ_i — совокупность параметров, характеризующих условия эксперимента, от которых зависит функция распределения по пробегам l .

При рассмотрении независимых возбуждений различных типов, с которыми связаны соответствующие энергетические потери, воспользуемся распределением Пуассона ⁽³⁾ и запишем в общем виде интенсивность отдельной линии (пика) в спектре х.п.э.э.

$$J_{v_1 v_2 \dots v_q}^{s_1 s_2 \dots s_p} = J_0 P(\gamma, s) \int_0^{\infty} f(\mu_i, l) \left[\prod_{r=1}^q \left(\frac{l}{\lambda_r} \right)^{v_r} \frac{1}{(v_r)!} \right] e^{-l/\lambda_0} dl,$$

где

$$P(\gamma, s) = \prod_{i=1}^p \frac{\gamma_i^{s_i} e^{-\gamma_i}}{(s_i)!}; \quad (2)$$

γ_i — параметр, характеризующий вероятность поверхностного возбуждения

i -го типа, λ_r — характерная длина пробега электрона в объеме вещества в процессе возбуждения r -го типа,

$$\frac{1}{\lambda_0} = \sum_{r=1}^q \frac{1}{\lambda_r},$$

s_1, s_2, \dots, s_p — верхние целочисленные индексы, характеризующие кратность потерь энергии соответственно на поверхностные возбуждения первого, второго, p -го типа (всего p значений по числу возможных поверхностных потерь энергии), $v_1, v_2, \dots, v_k, \dots$ — нижние целочисленные индексы, характеризующие кратность потерь энергии соответственно на объемные возбуждения первого, второго, \dots, k -го типа (всего q значений, по числу возможных объемных потерь энергии), J_0 — нормировочная постоянная, $s_i, v_r \geq 0$.

Выражение (2) может быть записано в виде

$$J_{v_1 v_2 \dots v_q}^{s_1 s_2 \dots s_p} = J_0 \lambda_0 P(\gamma, s) \prod_{r=1}^q \frac{\beta_r^{v_r}}{(v_r!)^s} \int_0^\infty f(\mu_i, \lambda_0 y) y^W e^{-y} dy, \quad (3)$$

где $\beta_r = \lambda_0 / \lambda_r$; $W = \sum_{r=1}^q v_r$ — число порций энергии, потерянных движущейся в объеме вещества частицей.

Поскольку функция $f(\mu_i, l)$ является интегрируемой и существенно положительной, то можно воспользоваться теоремой о среднем и записать точное выражение для интенсивности линии спектра х.п.э.э.

$$J_{v_1 v_2 \dots v_q}^{s_1 s_2 \dots s_p} = J_0 \lambda_0 P(\gamma, s) \left[\prod_{r=1}^q \frac{\beta_r^{v_r}}{(v_r!)^s} \right] f_w(\mu_i, \lambda_0 y_w) \Gamma(W+1); \quad (4)$$

здесь $f_w(\mu_i, \lambda_0 y_w)$ — среднее значение функции $f(\mu_i, \lambda_0 y)$. Индекс W поставлен для напоминания о том, что величина среднего значения зависит от суммы чисел кратностей объемных потерь энергии W .

Отсюда следует вывод о том, что для совокупности линий спектра х.п.э.э., характеризуемых одинаковой суммой чисел кратностей объемных потерь энергии W (назовем эту совокупность W -мультиплетом), соотношение интенсивностей этих линий не зависит от вида функции распределения электронов по пробегам, а определяется величинами параметров γ_i , β_r и полиномиальными коэффициентами.

Для заданного числа W при фиксированных γ_i , β_r и s_i W -мультиплет состоит из C_{W+q-1}^W линий, а интенсивности его составляющих относятся как соответствующие слагаемые в полиноме $(\sum_{r=1}^q \beta_r)^W$.

Из (3) следует, что при изменении экспериментальных условий, не меняющих величин γ_i и λ_r , интенсивность всех линий W -мультиплета изменится в одно и то же число раз. Интенсивность линий другого W -мультиплета, соответствующего другому числу W , в общем случае при этом изменится в другое число раз.

Этот общий вывод может быть использован при расчетах и анализе спектров х.п.э.э., когда неизвестно распределение электронов по пробегам. А вообще для каждого конкретных экспериментальных условий вид функции распределения по пробегам $f(\mu_i, l)$ известен лишь приближенно. Например, в спектрах «на прохождение» функция распределения по пробегам с ростом энергии падающих на образец электронов (нерелятивистский случай) приближается к δ -функции, т. е. все зарегистрированные электроны проходят в веществе примерно одинаковые пути l_p (в среднем

больше толщины образца). В этом случае $f(\mu_i, l) = \delta(l - l_p)$ и интенсивности линий определяются в соответствии с распределением Пуассона:

$$J_{v_1 v_2 \dots v_q}^{s_1 s_2 \dots s_p} = J_0 P(\gamma, s) \left[\prod_{r=1}^q \left(\frac{l_p}{\lambda_r} \right)^{v_r} \frac{1}{(v_r!)^s} \right] e^{-l_p/\lambda_0}. \quad (5)$$

Можно предположить, что в спектрах на отражение вид распределения по пробегам хорошо аппроксимируется функцией

$$f(\mu, l_0, l) = A \left(\frac{l}{l_0} \right)^\mu e^{-l/l_0}, \quad (6)$$

где из условий нормировки (1) константа $A = 1/[l_0 \Gamma(\mu+1)]$. Тогда

$$J_{v_1 v_2 \dots v_q}^{s_1 s_2 \dots s_p} = J_0 \beta_0^{\mu+1} P(\gamma, s) (\mu+1)_w \prod_{r=1}^q \frac{\xi_r^{v_r}}{(v_r!)^s}, \quad (7)$$

где $(\mu+1)_w$ — символ Похгаммера, $\beta_0 = \lambda_0/(l_0 + \lambda_0)$, $\xi_r = \beta_r l_0 / (l_0 + \lambda_0)$.

При $\mu=0$, т. е. тогда, когда функция распределения по пробегам имеет экспоненциальный характер, интенсивность пика оказывается пропорциональной величине

$$B = W! \prod_{r=1}^q \frac{\xi_r^{v_r}}{(v_r!)^s}. \quad (8)$$

Интересно отметить, что выражение (8) совпадает с формулой для интенсивности линий х.п.э.э., полученной в работе (2) при аппроксимации функции распределения электронов по пробегам в веществе с помощью матрицы «упругого просеивания».

Формулы (5), (7) и (8) могут быть использованы для аппроксимации спектров х.п.э.э. или спектров оже-электронов.

При этом может быть получена информация как о функции распределения по пробегам, так и о параметрах, характеризующих вероятность тех или иных возбуждений при различных экспериментальных условиях.

Институт ядерной физики
Академии наук КазССР
Алма-Ата

Поступило
6 IX 1973

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

- ¹ М. И. Корсунский, Я. Е. Генкин, Порошковая металлургия, № 12, 72 (1969).
- ² М. И. Корсунский, Я. Е. Генкин, Сборн. Электронная структура переходных металлов и их сплавов, в. 3, Киев, 1971, стр. 64. ³ Б. Г. Гнеденко, Курс теории вероятностей, М., 1961, стр. 129.