

Академик АН КазССР 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 соотношениях интенсивностей между различными линиями, особенно в случаях многотипных энергетических потерь, а также данных о функции распределения электронов по пробегаем в веществе. Некоторые особенности спектров многотипных х.п.э.э. обсуждены в работах <sup>(1, 2)</sup>, в которых получены формулы для интенсивностей отдельных линий спектра с помощью матриц «упругого просеивания», определяющих функцию распределения электронов по пробегаем в веществе. Целью настоящей работы является рассмотрение вопроса о соотношении интенсивностей линий в спектрах х.п.э.э. для более широкого класса функций распределения по пробегаем 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 пробегаем 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 частицы 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  $\mu_i$  — совокупность параметров, характеризующих условия эксперимента, от которых зависит функция распределения по пробегаем  $l$ .

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

$$J_{\nu_1 \nu_2 \dots \nu_p}^{s_1 s_2 \dots s_p} = J_0 P(\gamma, s) \int_0^{\infty} f(\mu_i, l) \left[ \prod_{r=1}^p \left( \frac{l}{\lambda_r} \right)^{\nu_r} \frac{1}{(\nu_r!)} \right] e^{-l/\lambda_0} dl,$$

где

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

$\gamma_i$  — параметр, характеризующий вероятность поверхностного возбуждения

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

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

$s_1, s_2, \dots, s_p$  — 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

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

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.

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

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., характеризуемых одинаковой суммой чисел кратностей объемных потерь энергии  $W$  (назовем эту совокупность  $W$ -мультиплетом), соотношения интенсивностей этих линий не зависят от вида функции распределения электронов по пробегам, а определяется величинами параметров  $\gamma_i, \beta_r$  и полиномиальными коэффициентами.

Для заданного числа  $W$  при фиксированных  $\gamma_i, \beta_r$  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  $\gamma_i$  и  $\lambda_r$ , 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., когда неизвестно распределение электронов по пробегам. А вообще для каждого конкретного 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  $\delta$ -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:

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

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

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

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

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

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

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