

НОВЫЙ МЕТОД РАСЧЕТА ФУНКЦИИ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ИНТЕНСИВНОСТИ ИЗЛУЧЕНИЯ ПО ГЛУБИНЕ $\varphi(\rho z)$ ПРИ ЛОКАЛЬНОМ ЭЛЕКТРОННО-ЗОНДОВОМ АНАЛИЗЕ

Е.В. Широкова

Калужский государственный педагогический университет

им. К.Э. Циолковского, г. Калуга

E-mail: Kate-info@inbox.ru

Существующие в настоящее время наиболее совершенные методы локальной диагностики наноматериалов базируются на таких физических явлениях как взаимодействие заряженных частиц и жесткого электромагнитного излучения с твердым телом. При взаимодействии электронного зонда с твердым телом возникает ряд физических явлений, которые могут быть зарегистрированы и использованы для формирования изображения исследуемой поверхности, а также для проведения количественного анализа различных микро областей этой поверхности.

При количественном рентгеноспектральном микроанализе материала измеряются интенсивности линий, излучаемые данным образцом. Содержания определенных элементов рассчитываются из соотношения этих интенсивностей к интенсивностям тех же линий стандартных образцов. Для того чтобы учесть различия составов стандарта и образца, а также его влияния на интенсивности излучаемых линий требуется провести ZAF – коррекцию. Для проведения ZAF-коррекции результатов измерений интенсивностей рентгеновских характеристических линий при локальном электронно-зондовом анализе необходимы точные данные о пространственном распределении интенсивности анализируемой линии по глубине в образце и эталоне, а именно: функции $\varphi(\rho z)$. В методе классической ZAF-коррекции $\varphi(\rho z)$ представляется простым, но не очень строгим выражением. Альтернативные методы коррекции используют относительно сложные функции.

В данной работе предлагается новый метод расчета функции $\varphi(\rho z)$, основанный на использовании результатов работы [1] по описанию пространственного распределения энергетических потерь пучка электронов средней энергии при нормальном падении на образец, а также результатов работы [2] по аналитическому описанию энергетических спектров киловольтных электронов, прошедших слой вещества заданной толщины.

При первичном методе возбуждения рентгеновского излучения пучком моноэнергетических электронов область генерации рентгеновского излучения практически совпадает с областью энергетических потерь первичных электронов пучка [2], и в соответствии с результатами работы [1] функция $\varphi(\rho z)$ может быть представлена в виде:

$$\varphi(\rho z) = \frac{(1 - \eta_1 - 0,43\eta_2)}{AH} \cdot E_0 \exp\left\{-\frac{(\rho z - \rho z_p)^2}{\rho^2 \cdot z_p^2 + z_p z}\right\} + \frac{1,085 \eta_1}{\pi^{1/2} z_{ms}} E_0 \exp\left\{-\left(\frac{\rho z - \rho z_{ss}}{\rho z_{ss}}\right)^2\right\}, \quad (1)$$

где z_{ms} [мкм] – глубина максимальных потерь энергии первичными электронами, испытавшими малоугловое рассеяние и поглощенные мишенью, E_0 [кэВ] – энергия пучка первичных электронов, а z_{ss} [мкм] – глубина максимальных потерь энергии обратно рассеянными электронами, ρ – плотность мишени.

Выражение (1) выявляет детали реальных распределений, учитывает вклад обратного рассеяния в процесс ионизации атомных оболочек и дает необходимую основу для проведения расчетов функции $\varphi(\rho z)$ для целей рентгеноспектрального микроанализа. В тоже время в нём не учтены два важных момента:

1. Для образцов с низким средним атомным номером влияние неупругого рассеяния электронов пучка на распределение энергетических потерь и $\varphi(\rho z)$, помимо уменьшения величины z_{tr} по сравнению к l_{tr}^{el} , должно приводить и к ослаблению зависимости вероятности первичными электронами, испытавшими большой пробег вглубь образца с ростом z . Это может быть учтено уменьшением зависимости от z величины z_p ($z_p + z$) в показателе степени $\varphi_1(\rho z)$ первой части выражения (1) путём замены z на $\alpha \cdot z$ ($\alpha \leq 1$ и зависит от элементного состава образца и энергии электронного пучка). Теоретически рассчитать величину α сложно. Нами предлагается эмпирически установленная зависимость α от отношения величины максимального пробега R_T [3] электронов пучка в образце к величине z_p в виде:

$$\alpha = 1 - \exp\left(-\left(R_T / 3,63 z_p\right)^{6,67}\right). \quad (2)$$

Это позволяет значительно точнее описывать спад распределения функции $\varphi(\rho z)$ вглубь образца для материалов с низкими значениями среднего атомного номера и даёт основу проведения расчетов распределений $\varphi(\rho z)$ для условий так называемого низкого перенапряжения, когда E_0 не слишком превышает величину E_c и нижняя граница локального анализа по глубине генерации рентгеновского излучения z_c [2] может стать меньше R_T .

2. При многократном рассеянии первичных электронов в исследуемом образце после прохождения расстояния, равного примерно транспортному пробегу z_{tr} , любые направления движения для них становятся равновероятными. Часть электронов, отклонившихся от первоначального направления на 180° , испытает возвратное движение в направлении поверхности. При этом вероятность потерять часть энергии на ионизацию для них возрастает [4,5]. Этот процесс ответственен за формирование максимума распределений плотности энергетических потерь поглощёнными электронами и максимума интенсивности $\varphi_1(\rho z)$, генерируемого ими рентгеновского характеристического излучения, на глубине $z_p = 0,77 \cdot z_{tr}$. Поэтому и распределение энергетических потерь поглощенных электронов и соответствующее ему распределение интенсивности излучения по глубине

должны быть практически симметричными относительно наиболее вероятного пробега электронов z_p . Учет этого факта может быть осуществлён, если модифицировать выражение (1) для $\varphi(\rho z)$ следующим образом:

$$\varphi(\rho z) = \varphi_1(\rho z) + \varphi_2(\rho z), \text{ где } \varphi_1(\rho z) = \begin{cases} \varphi_1(\rho z), & z \geq z_p \\ \varphi_1(\rho z_p + |\rho z - \rho z_p|), & z < z_p \end{cases}, \quad (3)$$

где распределения поглощенных $\varphi_1(\rho z)$ и обратно рассеянных $\varphi_2(\rho z)$ электронов имеют вид соответственно:

$$\varphi_1(\rho z) = \frac{(1 - \eta_1 - 0,43\eta_2)}{AH} \cdot E_0 \exp\left\{-\frac{(\rho z - \rho z_p)^2}{\rho^2(z_p^2 + \alpha z_p z)}\right\} \quad (4)$$

$$\varphi_2(\rho z) = \frac{1,085\eta_1}{\sqrt{\pi z_{ms}}} E_0 \exp\left\{-\left(\frac{\rho z - \rho z_{ss}}{\rho z_{ss}}\right)^2\right\}. \quad (5)$$

Данное математическое выражение позволяет учесть симметрию протекания процесса ионизации атомных оболочек первичными электронами относительно z_p и соответственно отражает симметрию графика функции $\varphi_1(\rho z)$.

На рис.1, рис.2 представлены функции распределения интенсивности излучения по глубине $\varphi(\rho z)$ медной и алюминиевой мишеней.

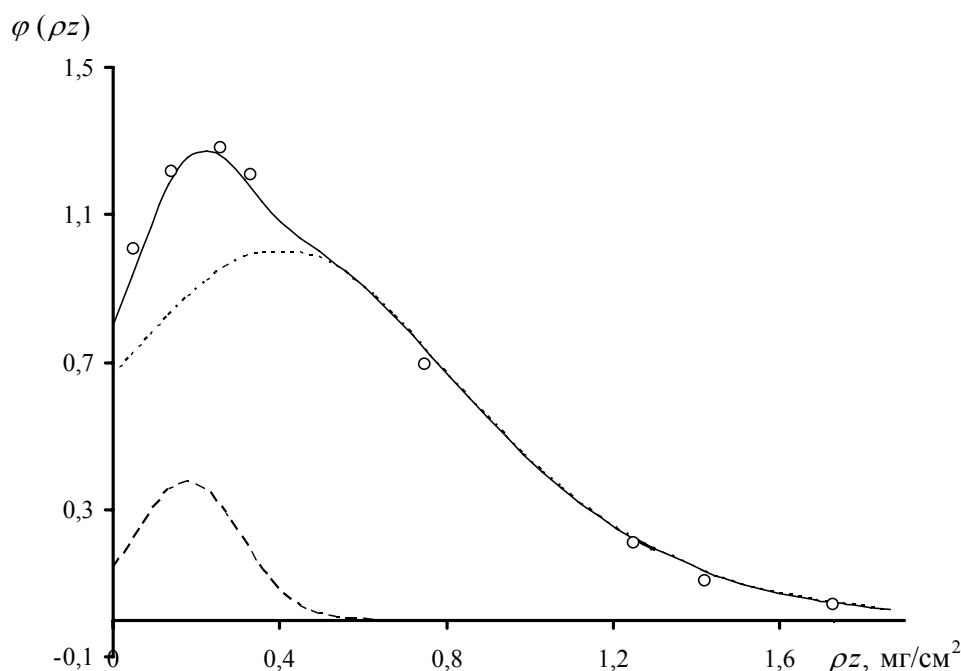


Рис.1 Функция распределения интенсивности излучения по глубине $\varphi(\rho z)$ для меди. Расчеты проведены по формулам (2) – (5) при нормальном падении пучка с энергией $E_0 = 29$ кэВ. Экспериментальные данные получены методом «меченого слоя» классической работы [6] Кастена-Дескамба.

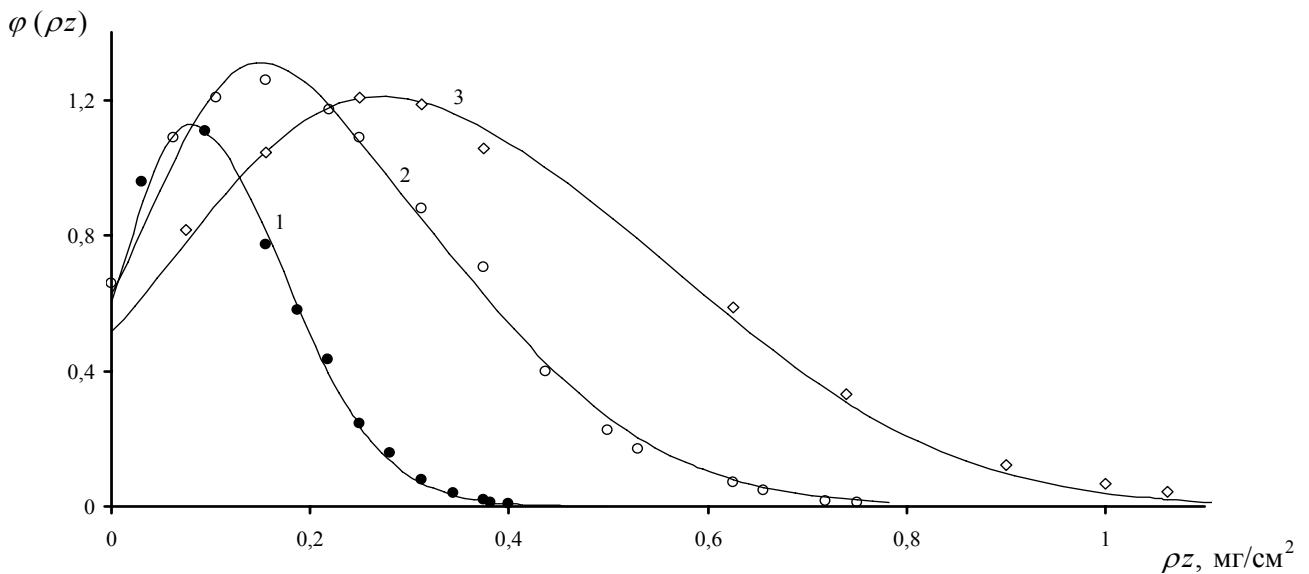


Рис.2 Функция распределения интенсивности излучения по глубине $\varphi(\rho z)$ для алюминия при нормальном падении пучка с энергиями: 1 – 10 кэВ, 2 – 15 кэВ и 3- 20 кэВ. Расчеты проведены по формулам (2) – (5). Экспериментальными данными, получены методом «меченого слоя» классической работы [7] Кастена-Энока.

В результате проведенных исследований был разработан новый метод расчёта функции $\varphi(\rho z)$ для локального электронно-зондового микроанализа. Полученное аналитическое выражение для функции $\varphi(\rho z)$ учитывает: наличие обратно рассеянных первичных электронов со средней энергией $\langle E \rangle = (1 - Z^{1/3}) E_0$ и влияние неупругого рассеяния электронов пучка на распределение $\varphi(\rho z)$ в образцах с низким значением среднего атомного номера; пространственную симметрию протекания процесса многократного рассеяния относительно положения координаты максимума z_p распределения $\varphi_1(\rho z)$ поглощенных электронов пучка. Полученные результаты дают основание надеяться, что данная модель функции $\varphi(\rho z)$ будет востребована в практике рентгеновского микроанализа и повысит эффективность количественного описания информативных сигналов при исследовании различных материалов, проводимых с помощью хорошо сфокусированных электронных пучков.

1. Н.Н.Михеев, М.А.Степович // Заводская лаборатория, 1996, №4, С. 20-25.
2. N.N.Mikheev, M.A.Stepovich // Mater. Sci. Eng. B, 1995, Vol. 1-4, P. 11-16.
3. H.-J.Fitting // Phys. Stat. sol. (a) 1974. P. 525 – 535.
4. Н.Н.Михеев, В.И.Петров, М.А.Степович // Известия АН СССР. Серия физическая. 1991. Т. 55. №8. С.1474 – 1482
5. Н.Н.Михеев, М.А.Степович, С.Н.Юдина // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. 2009. №3. С. 53 – 57.
6. R.Casteaing, J.Descamps // J. Phys. Rad., 1955, Vol.16, P.304.
7. R.Casteaing, J.Henoc Optique des Rayons X et Microanalyse, eds.,Hermann, Paris, 1966, P.120.