

用蒙特卡罗方法计算电子在固体中透射系数和 X 光激发深度

何延才 黄月鸿

(中国科学院上海硅酸盐研究所)

1980 年 12 月 29 日收到

1963 年 Green 首先用蒙特卡罗方法解决电子探针显微分析工作中存在的问题以来,这一方法得到广泛应用^[1]。其中以 G. Love 等提出的方法较好^[2],其特点是计算简单,所得结果与实验相当符合。但对重元素计算的 X 射线分布函数 $\phi(\rho z)$ 与实验相差较大。

本文通过大量计算对几种参数作了选取,使计算结果尽可能与多方面的实验事实相一致。

文中计算了电子在固体中穿透系数 τ ,也计算了 X 射线激发深度。

一、物理参量选取及计算过程

电子在固体中的 Bethe 路径 ρS_m 有两种计算方法:一是 G. Love 抛物外推两段积分法;一是 Worthington 方法^[3],取

$$\rho S_m = - \int_{1.03J}^{E_0} \frac{1}{dE/d(\rho S)} dE.$$

在入射电子能量 10keV 到 200keV 范围内,我们对硼到铀间 40 个元素分别用以上两法计算了 ρS_m ,发现后一方法计算的 ρS_m 较前者要高 0.2—4%,鉴于 G. Love, Newbury, Murata 等计算的 $\phi(\rho z)$ 均比实测曲线过早趋于零,本文认为用 Worthington 方法可对 $\phi(\rho z)$ 计算结果有所改善。

出于同样考虑,用 Duncumb 平均电离电位 J 表达式比用 Berger-Settzer 的要好。Newbury 对此作了研究^[1]。

散射过程中,碰撞参量是电子未发生偏转时最接近原子核的距离。在蒙特卡罗模拟中,最大碰撞参量 P_0 是用实测背散射系数 η 来校正的。本文在 Duncumb 的 P_0 公式基础上,作了大量计算,发现 P_0 取 $0.874 Z^{0.4}/E_0$ 时,计算的 $\eta, \tau, \phi(\rho z)$ 与多方面的实验结果一致。

1. 计算条件

对 1000 个电子作蒙特卡罗模拟;电子两次散射间的路程取为 ρS_m 的百分之一;电子束垂直入射。

2. 计算结果

(1) 背散射系数 η : 本文计算了 30keV 电

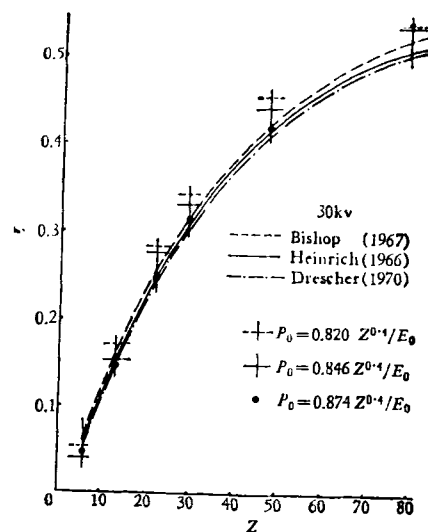


图 1 η -Z 关系曲线

子作用下, C, Al, Ti, Cu, Ag, Au 的 η 值, 与 Bishop^[4], Heinrich^[11] 及 Drescher^[15] 的实验结果一致(见图 1)。Au 的 η 计算值比实验结果偏高, 且对 P_0 的变化不敏感。

(2) X 射线深度分布函数 $\phi(\rho z)$: 本文计算的 Al, Cu $\phi(\rho z)$ 曲线与 G. Love 的结果一样, 与实验事实十分一致。本工作 Pb $\phi(\rho z)$ 计算结果比 G. Love 的有所改善(见图 2)。计算中使用 Worthington 的电离截面公式:

$$\phi(U) = \frac{\text{常数}}{U} \ln U,$$

$U = E/E_c$, E_c 为电子临界激发电位。

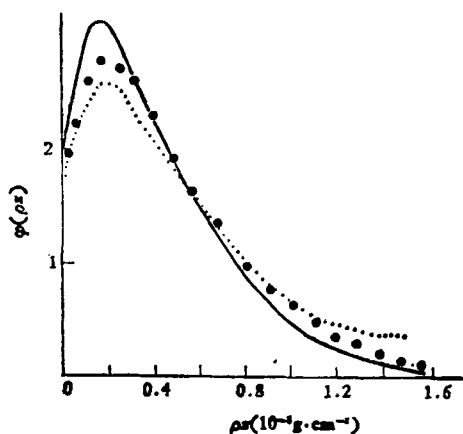


图 2 本工作与 G. Love 计算结果及实验曲线比较
 —— 29keV 时, G. Love 对 Pb $\phi(\rho z)$ 的蒙特卡罗计算曲线;
 ● 29keV 时, 本文对 Pb $\phi(\rho z)$ 的蒙特卡罗计算曲线;
 29keV 时, Vignes. Dez 对 Pb $\phi(\rho z)$ 的计算曲线(1968 年)

二、电子在固体中作用深度

定量地了解电子在固体中透射系数, X 射线激发深度对电镜工作及电子探针工作有较大意义。

1. 电子在固体中透射系数 τ 的计算

Krifting 和 Reimer 用蒙特卡罗方法计算了 100keV 电子在 Al, Au 中的 τ 值^[6], 与他们的实验结果很一致。

用本文提出的方法, 在 20—200keV 范围

内对 C, Al, Si, Cr, Ag, Au 计算了 τ 值, 与 Krefting 等的实验很符合。计算过程也简单得多。

计算 τ 原理: 入射电子在固体中每遭受一次散射时均可算出一个垂直于固体表面的质量深度 ρz , 于是得 $\rho z_1, \rho z_2, \dots, \rho z_n, \dots$ 一组数。对每一入射电子在 $\rho z_1, \rho z_2, \dots, \rho z_n, \dots$ 中求出最大值 ρz_{\max} 。将 1000 个 ρz_{\max} 由小到大排列(同时记录此时的电子能量), 就可得到 $\tau \sim \rho z$ 关系曲线(见图 3)。

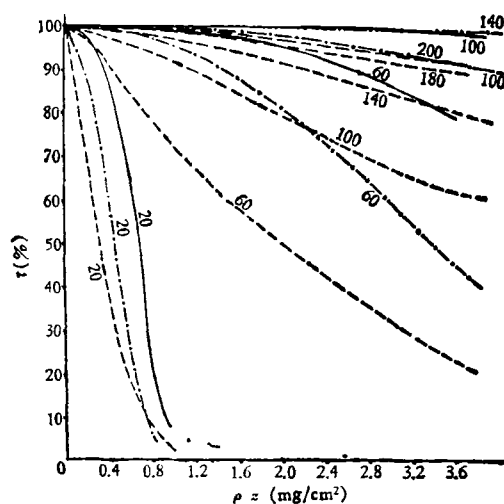


图 3 电子透射系数 τ

——C; - - - -Si; - · - · - Au. 曲线上数字为加速电压 (kV)

有了碳的 τ 曲线, 可以定量地分析碳膜对 X 射线强度的影响。加速电压为 20kV 时, 99.9% 的电子能透过 0.0113mg/cm² (约 500 Å) 的碳膜, 从结果看, 穿透 500 Å 碳膜的电子能量基本没有损失。因此, 非导电样品作电子探针定量分析时, 其上蒸的碳膜(一般约 200 Å)对样品中 X 射线激发的影响可以忽略。

2. X 射线激发深度 d_x^0, d_x' 的计算

d_x^0 是 X 射线理论激发深度, $\phi(\rho z)$ 曲线刚刚为零时的 ρz 即为 d_x^0 。固体中深度大于 d_x^0 处将不存在所考虑的 X 光光子。

$\phi(\rho z)$ 在等于零之前变化非常缓慢, 曲线尾部拖得很长。X 射线显微分析仪的灵敏度不

大可能把X光强度极微小的增加反映出来,故 d_x^0 的实用意义不大.

本文计算了占X射线总强度99%时的激发深度 d'_x . d'_x 的定义是

$$\frac{\int_0^{d'_x} \phi(\rho z) d\rho z}{\int_0^{\infty} \phi(\rho z) d\rho z} = 99\%$$

式中 d'_x 可视为实际深度,比 d_x^0 更深范围产生的X射线强度占1%考虑吸收则更小,实际工作中可以忽略.

在10—50kV范围内对C, Al, Ti, Cu, Ag, Au计算了 d_x^0 与 d'_x . C, Al, Ti, Cu为 K_α 线系, Ag, Au为 L_α 线, $\phi(\rho z)$ 计算的可靠性在文献[7]工作中得到证实.

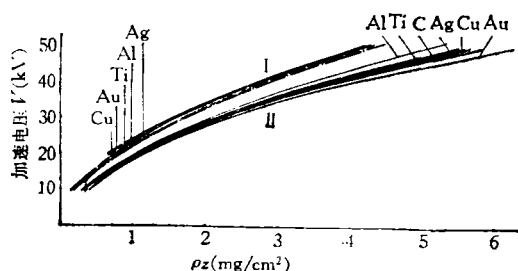


图4 固体中X射线激发深度

(线族 I: d'_x 自上而下为 Cu, Au, Ti, Al, Ag.

线族 II: d_x^0 自上而下为 Al, Ti, C, Ag, Cu, Au)

结果表明,随着加速电压增高,Al和Au的 d_x^0 相差越大, d_x^0 曲线逐渐发散,但 d'_x 曲线则

一直很集中.我们还计算了 Rb(K_α), Zr(L_α), Ba(L_α), Ta(L_α) 的深度,结果均落在图4中的 d_x^0 , d'_x 线族之中.

文献[8]列出了用 Castaing, Andersen, Reed 等人经验公式计算出的 Cu(K_α) X射线激发深度值, Castaing 的结果比 Reed 的高出一倍. Andersen 的结果介于两者之间.本文的结果与 Andersen 的一致.

蒙特卡罗计算在 WAGN2200VS 机上进行.

吴自勤老师对本工作给了热情支持,郭常霖同志提出过宝贵建议,上机计算中得到曹立群、熊寿岗等同志大力协助,特此致谢.

参 考 文 献

- [1] Kurt F. J. Heinrich et al., eds., NBS SPECIAL PUBLICATION (1976), 460.
- [2] G. Love, M. G. C. Cox, V. D. Scott, *J. Phys. D*, **10** (1977), 7.
- [3] S. J. B. Reed, *Electron Microprobe Analysis*, Cambridge University Press, p. 212.
- [4] H. E. Bishop, *Brit J. Appl. Phys.*, **18** (1967), 703.
- [5] H. Drescher, et al., *Zeit. Angew. Phys.*, **29**(1970), 331.
- [6] E. R. Krefting and L. Reimer, *Quantitative Analysis with Electron Microprobes and Secondary Ion Mass Spectrometry*, Ed. by E. Preuss, (1973), 114.
- [7] 何延才等, *物理学报*, **31**(1982), 115.
- [8] J. I. Goldstein, et al., eds., *Practical Scanning Electron Microscopy*, (1976), 84.

微波铁氧体材料自旋波共振线宽 ΔH_k 的测量

丘 其 俊

(北京无线电测量所)

1981年7月13日收到

一、引 言

自旋波共振线宽 ΔH_k 是微波铁氧体材料的重要参数,不仅材料的高功率性能与它有关,

物理

而且在实用中当材料工作在远离共振区时,它也表征损耗的大小.为了全面标定材料的性能,测量它是必要的.

在横向激励的微波铁氧体材料中的自旋波现象早在50年代初就已发现并作了全面的实