

Monte Carlo 方法计算 X 射线空间分辨率

何延才

曹立群

(中国科学院上海硅酸盐研究所)

(上海市物资局计算站)

一、引言

X 射线空间分辨率 R_x 对于定量电子束显微分析工作是一个很重要的参数。对此, Reed、Duncumb、Castaing 等都提出了各自计算 R_x 的经验公式^[1,2]。这些公式之间差别较大,且都处理成与原子序数无关,即忽略了不同元素中电子散射的差异,另外,在这类公式中,入射电子的束斑直径对 R_x 的影响也没有准确地反映出来,因此有必要对 R_x 值进行理论计算。

本文用 Monte Carlo 模拟方法对 C、Al、Ti、Cu、Ag、Au 等元素计算了不同能量、不同直径电子束作用下的 X 射线空间分辨率,得出了一些有意义的结论。

二、计算方法

在固体中,入射电子激发 X 射线光子的数目,离入射点愈远愈稀疏。因此,本文把占 X 射线光子总数 99% 的空间区域定义为实际空间分辨率 R'_x 。

入射电子激发的 X 射线源在固体中呈大半球状分布。为了计算 R'_x , 我们假想将“光子分布球”沿电子束入射方向切成很多等厚薄片(图 1), 第 1 片、第 2 片、…与第一片、第二片、…对称地分别位于电子束中轴线两侧。每片厚度 $\Delta\rho x$ 取为 $\rho S_m/100$, ρS_m 为 Bethe 范围。

设 N 为最后一片的序数,用 Monte Carlo 方法统计计算出第 i 片中 X 射线光子总的激发几率 Q_i , 由

$$\sum_{i=1}^n Q_i / \sum_{i=1}^N Q_i = 0.99,$$

图 1 计算 X 射线空间分辨率 R'_x 示意图

可解出正整数 n 。 $n\Delta\rho x$ 为空间分辨率 R'_x 的二分之一,考虑到 X 射线光子分布的轴对称性,则

$$2n\Delta\rho x = R'_x.$$

为了模拟真实实验条件,本本采取 Gaussian 电子束入射^[3],采用文献[4]的模型计算电子在固体中的散射。模型的可靠性在文献[5]的工作中得到验证。

三、结 果

Gauss 分布电子束直径 $1\mu m$, 入射电子能量分别为 10、15、20、25、30、35 keV 时对 C、

本文 1983 年 3 月 17 日收到。

Al、Ti、Cu、Ag、Au 等常见元素计算了 R'_x 值, 见表 1、图 2。C、Al、Ti、Cu 用的 K_α 线, Ag、Au 用的 L_α 线。电子能量为 20keV, 电子束直径分别为 0、0.5、1.0、1.5、2.0、2.5 μm 时对上述元素的 R'_x 值作了计算, 见表 2 和图 3。

表 1 X 射线空间分辨率与人射电子能量的关系

元素 \ 计算内容		电子能量 E_0 (keV)	10	15	20	25	30	35
C	$R'_x(10\text{mg} \cdot \text{cm}^{-2})$		0.0526	0.1038	0.1657	0.2261	0.3085	0.4130
	$R'_x(\mu\text{m})$		2.3384	4.6153	7.3625	10.0473	13.7112	18.3570
Al	$R'_x(10\text{mg} \cdot \text{cm}^{-2})$		0.0549	0.0874	0.1381	0.2193	0.3087	0.3882
	$R'_x(\mu\text{m})$		2.0340	3.2356	5.1156	8.1239	11.4352	14.3765
Ti	$R'_x(10\text{mg} \cdot \text{cm}^{-2})$		0.0778	0.0999	0.1467	0.2205	0.3327	0.3984
	$R'_x(\mu\text{m})$		1.7285	2.2205	3.2591	4.8994	7.3939	8.8531
Cu	$R'_x(10\text{mg} \cdot \text{cm}^{-2})$		0.1481	0.1486	0.1781	0.2330	0.3131	0.3928
	$R'_x(\mu\text{m})$		1.6582	1.6640	1.9939	2.6096	3.5060	4.3992
Ag	$R'_x(10\text{mg} \cdot \text{cm}^{-2})$		0.1780	0.1924	0.2326	0.2914	0.3494	0.4441
	$R'_x(\mu\text{m})$		1.6955	1.8324	2.2155	2.7748	3.3281	4.2292
Au	$R'_x(10\text{mg} \cdot \text{cm}^{-2})$			0.3080	0.3297	0.3585	0.3915	0.4786
	$R'_x(\mu\text{m})$			1.6312	1.7463	1.8987	2.0737	2.5348

表 2 X 射线空间分辨率与 Gauss 分布电子束直径的关系

元素 \ 计算内容		电子束直径 d (μm)	0	0.5	1.0	1.5	2.0	2.5
C	$R'_x(10\text{mg} \cdot \text{cm}^{-2})$		0.1679	0.1588	0.1657	0.1679	0.1747	0.1793
	$R'_x(\mu\text{m})$		7.4634	7.0600	7.3625	7.4634	7.7659	7.9677
Al	$R'_x(10\text{mg} \cdot \text{cm}^{-2})$		0.1451	0.1405	0.1381	0.1451	0.1522	0.1639
	$R'_x(\mu\text{m})$		5.3757	5.2023	5.1156	5.3757	5.6358	6.0693
Ti	$R'_x(10\text{mg} \cdot \text{cm}^{-2})$		0.1438	0.1409	0.1467	0.1639	0.1840	0.2099
	$R'_x(\mu\text{m})$		3.1952	3.1313	3.2591	3.6425	4.0898	4.6649
Cu	$R'_x(10\text{mg} \cdot \text{cm}^{-2})$		0.1208	0.1335	0.1781	0.2416	0.3116	0.3847
	$R'_x(\mu\text{m})$		1.3530	1.4954	1.9939	2.7060	3.4894	4.3083
Ag	$R'_x(10\text{mg} \cdot \text{cm}^{-2})$		0.1774	0.1971	0.2326	0.2957	0.3746	0.4613
	$R'_x(\mu\text{m})$		1.6898	1.8775	2.2155	2.8163	3.5673	4.3934
Au	$R'_x(10\text{mg} \cdot \text{cm}^{-2})$		0.1308	0.1936	0.3297	0.4762	0.6332	0.7850
	$R'_x(\mu\text{m})$		0.6930	1.0256	1.7463	2.5225	3.3540	4.1579

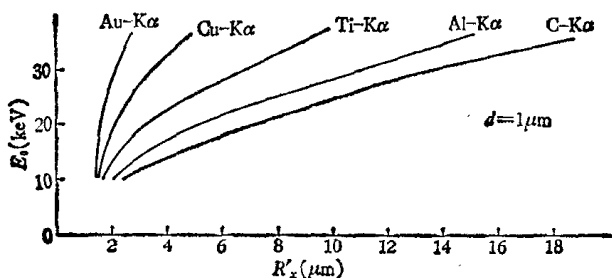


图2 入射电子能量与X射线空间分辨率 R'_x 关系曲线
电子束直径 $1 \mu\text{m}$
(图中 $\text{Au-K}\alpha$ 应为 $\text{Au-L}\alpha$)

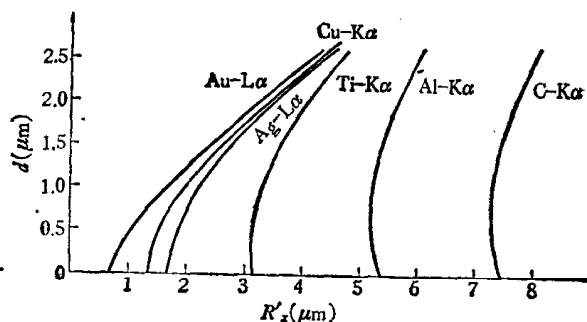


图3 电子束直径与X射线空间分辨率 R'_x 关系曲线
入射电子能量 20keV

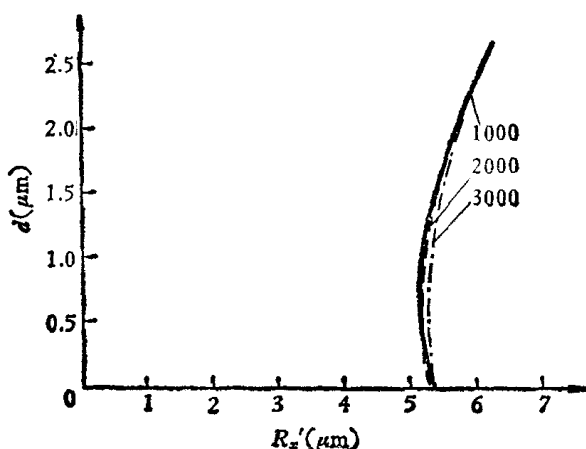


图4 模拟计算电子数为1000、2000、3000时，Al的X射线空间分辨率 R'_x 与电子束直径关系曲线

d 从0增加到 $1.5 \mu\text{m}$ 过程中,轻元素(如C、Al)的 R'_x 值先减小再逐渐增大,成一反常的弓形.若 Monte Carlo 模拟计算的电子越多,这一反常弓形就逐渐变直(图4).重元素就没有此现象.因此,电子探针显微分析常用的电子束直径范围内,不能认为 d 对 R'_x 的贡献是一个简单的相加关系,如 Castaing 的公式所表明的^[2]. 应该注意到不同元素中电子散射的差异和电子束中电子的实际 Gauss 分布.

Monte Carlo 模拟计算在 WANG VS100 计算机上进行,占 cpu 时间约 40 小时.

四、结 论

1. 随入射电子能量 E_0 的增加,元素的原子序数 z 越低, R'_x 增加越快.这是由于 Bethe 范围 ρSm 随 E_0 而增加,而轻元素的 ρ 值小, R'_x 增加就快.如果以质量长度为单位,这一现象与原子序数关系不大(表1),但也不是如经验公式所表明的与 z 毫无关系.

2. 当电子束直径增加时, z 越高, R'_x 增加越显著.因为重元素中大角度弹性散射事件较多,电子容易横向扩展,这样重元素的 R'_x 随 d 变化显著.

参 考 文 献

- [1] Reed, S. J. B., *Electron Microprobe Analysis*, Cambridge University Press, London, 1975, 214.
- [2] Beaman, D. R. & Isasi, J. A., *Electron Beam Microanalysis*, ASTM Special Technical Publication 506, Printed in Baltimore Md., 1972, 10.
- [3] 何延才、曹立群, Monte Carlo 方法计算微颗粒中X射线强度,物理学报(待发表).
- [4] 何延才、黄月鸿,物理, 11(1982), 537.
- [5] Ho Yen-cai (何延才) & Huang Yue-hong (黄月鸿), *SEM/1982, II* (O. Johari ed.), IITRI, Chicago, IL, 559—562.