Это означает, что канал взаимодействия частиц через среду посредством "обмена" молекулой газа оказывается значительно более эффективным, нежели прямые столкновения.

Следует отметить, однако, что указанный механизм обусловливает сравнительно слабое взаимодействие частиц, поскольку $J_{pp} \sim n_p/n_g\sqrt{\varepsilon_g} \ll \sqrt{\varepsilon_g}$. Поэтому обычно в правой части уравнения (7) достаточно сохранить последние два члена.

В заключении подчеркнем еще раз, что система уравнений Больцмана применима для описания переноса лишь в ультраразреженной газовзвеси. Использование же уравнений Больцмана для описания динамики умеренно разреженной газовзвеси будет приводить как к количественно, так и к качественно неверным результатам.

Авторы признательны фонду Собора, при финансовой поддержке которого осуществлена эта работа.

Список литературы

[1] *Рудяк В.Я.* // Письма в ЖТФ. 1992. Т. 18. Вып. 20.
[2] *Климонтович Ю.Л.* Кинетическая теория неидеального газа и неидеальной плазмы. М.: Наука, 1975. 352 с.

Новосибирский инженерно-строительный институт

Поступило в Редакцию 24 марта 1993 г.

01;10;12

Журнал технической физики, т. 64, в. 4, 1994

ВОССТАНОВЛЕНИЕ ТОНКОЙ СТРУКТУРЫ СПЕКТРА БЕЗ ИЗМЕРЕНИЯ АППАРАТНОЙ ФУНКЦИИ СПЕКТРОМЕТРА

В.А.Горелик

1. Восстановление тонкой структуры спектра сводится к решению интегрального уравнения Фредгольма 1-го рода

$$u(E_0) = \int_{-\infty}^{\infty} K(E - E_0) \cdot z(E) \cdot dE, \tag{1}$$

где $z(E)$ — истинный, $u(E_0)$ — регистрируемый спектры, $K(E - E_0)$ — аппаратная функция спектрометра [1].

Традиционный подход к решению этой задачи состоит в том, чтобы измерить $K(E - E_0)$, а затем решить уравнение (1) относительно $z(E)$. Поскольку задача является математически некорректной [2], то желательно знать исходные функции $u(E_0)$ и $K(E - E_0)$ как можно более точно. Точность определения $u(E_0)$ ограничивается только шумами и в принципе может быть сделана достаточно высокой. Что касается $K(E - E_0)$, то нам вообще неизвестны корректные процедуры ее определения. Общепринятые методы, когда на вход спектрометра подается δ-образный (по энергии) сигнал, а сигнал на выходе спектрометра полагается равным $K(E - E_0)$, обладают существенным изъяном. Дело в том, что сигнал на выходе спектрометра зависит не только от энергетического распределения частиц на входе спектрометра, но и от их углового распределения. Поэтому аппаратная функция, измеренная на выходе спектрометра при δ-образном сигнале на его входе (будь то упругорассеянные частицы или частицы, испущенные монохроматором), отличается от аппаратной функции, имевшей место при регистрации спектра $z(E)$. Истинная аппаратная функция зависит от углового распределения частиц, испущенных объектом, которое заранее известно и поэтому не может быть смоделировано.

Цель настоящей работы состоит в том, чтобы предложить и исследовать математически процедуру восстановления тонкой структуры спектра, свободную от указанного недостатка.

2. Идея предлагаемого метода состоит в том, чтобы провести две регистрации одного и того же спектра, но с различными аппаратными функциями. При этом необходимо, чтобы вторая аппаратная функция $K_2(E - E_0)$ выражалась некоторым заранее известным способом через первую аппаратную функцию $K_1(E-E_0)$. В результате мы получим систему двух интегральных уравнений с двумя неизвестными функциями: с истинным спектром $z(E)$ и с первой аппаратной функцией $K_1(E - E_0)$.

Реализовать данную идею можно, например, с помощью двухступенчатого анализатора Палмберга с предторможением [3]. Первый спектр $u_1(E_0)$ регистрируется при некоторой определенной разности потенциалов ΔV_1 между внутренним и внешним цилиндрами анализатора. Вид аппаратной функции анализатора при этом полностью определяется а) геометрией анализатора, б) значением величины ΔV_1 и в) угловым распределением частиц на входе анализатора. Предполагается, что источник частиц точечный и находится в центре сферических сеток и что наличие сеток не влияет на угловое распределение частиц, поступающих в пространство между цилиндрами. Второй спектр $u_2(E_0)$ регистрируется при другой разности потенциалов ΔV_2 между внутренним и внешним цилиндрами анализатора. Поскольку угловое распределение частиц в этом случае остается тем же, что и при первой регистрации, а разность потенциалов между цилиндрами изменяется в $m = \Delta V_1/\Delta V_2$ раз, то, как легко показать,

$$K_1(E - E_0) = K_2\left(\frac{E - E_0}{m}\right). \tag{2}$$

3. Система интегральных уравнений, связывающая зарегистрированные спектры, истинный спектр и аппаратные функции, имеет после преобразования Фурье следующий вид:

$$\tilde{u}_1(\omega) = \tilde{K}_1(\omega) \cdot \tilde{z}(\omega), \tag{3}$$

$$\tilde{u}_2(\omega) = \tilde{K}_2(\omega) \cdot \tilde{z}(\omega), \tag{4}$$

где тильда означает фурье-образ соответствующей функции.

Из равенства (2) следует соотношение

$$\tilde{K}_2(\omega) = \frac{1}{m}\tilde{K}_1(\omega/m). \tag{5}$$

Поделив выражение (3) на выражение (4), получим уравнение относительно $\tilde{K}_1(\omega)$

$$\frac{\tilde{K}_1(\omega)}{\tilde{K}_1(\omega/m)} = f(\omega), \tag{6}$$

где

$$f(\omega) = \frac{1}{m}\frac{\tilde{u}_1(\omega)}{\tilde{u}_2(\omega)} \tag{7}$$

— известная из эксперимента функция.

Если мы сможем решить уравнение (6), то из уравнения (3) можно будет найти $\tilde{z}(\omega)$.

Формально решение уравнения (6) имеет вид

$$\tilde{K}_1(\omega) = f(\omega)\cdot f(\omega/m)\cdot f(\omega/m^2)\cdot f(\omega/m^3)\cdot f(\omega/m^4)\cdot\ldots, \tag{8}$$

в чем можно легко убедиться непосредственно подстановкой.

Легко показать, что $f(\omega)\to 1$ при $\omega\to 0$ (это следует из того, что $\tilde{u}(0)$ есть произведение площадей под $K(E-E_0)$ и под $z(E)$). Следовательно, начиная с некоторого номера, все члены произведения (8) становятся близкими к 1. Но сходится ли это произведение?

4. Докажем существование функции

$$\tilde{K}_1(\omega) = \prod_{k=0}^{\infty} f(\omega/2^k). \tag{9}$$

Здесь для простоты изложения использовано двукратное сжатие аппаратной функции ($m = 2$), что не сказывается на общности доказательства.

Введем функцию $l(\omega) = \ln[f(\omega)]$. Очевидно, что $l(0) = 0$. Потребуем, чтобы при $\omega = 0$ функция $l(\omega)$ имела производную, модуль которой меньше, чем некоторое конечное число A. Это означает, что найдется такое ω_0, что при всех $0<\omega<\omega_0$ справедливо неравенство $|l(\omega)| < \omega\cdot A$.

Как известно [4], для сходимости бесконечного произведения вида (9) достаточно, чтобы сходился ряд

$$\sum_{k=0}^{\infty}\left|l(\omega/2^k)\right|. \tag{10}$$

А для этого достаточно, чтобы для любого $\varepsilon>0$ существовало такое n (зависящее от ω и ε), что

$$\sum_{k=n+1}^{\infty}\left|l(\omega/2^k)\right| \leqslant \varepsilon.$$

Но при достаточно больших n имеет место неравенство $\omega/2^n<\omega_0$ и, следовательно, $|l(\omega/2^n)| < A\cdot\omega/2^n$, т.е.

$$\sum_{k=n+1}^{\infty}\left|l(\omega/2^k)\right| \leqslant \sum_{k=n+1}^{\infty}\frac{A\cdot\omega}{2^k} = \frac{A\cdot\omega}{2^n}.$$

Следовательно, при n, удовлетворяющих неравенствам $\omega/2^n < \omega_0$ и $A \cdot \omega/2^n < \varepsilon$, условие сходимости ряда (10), а следовательно, и ряда (9) выполняется. Тем самым доказано существование функции $\tilde{K}_1(\omega)$, т.е. существование решения уравнения (6).

5. Это решение является единственным. Оно определено с точностью до постоянного множителя. Следовательно, и искомый спектр $z(E)$ может быть найден также с точностью до постоянного множителя. Покажем, что решений другого вида не существует. Для этого будем рассматривать в качестве решений только такие функции $\tilde{K}_1(\omega)$, которые удовлетворяют условию $\tilde{K}_1(0) = 1$.

Допустим, что кроме $\tilde{K}_1(\omega)$ существует еще хотя бы одно решение $g(\omega)$ уравнения (6). Тогда

$$\frac{g(\omega)}{g(\omega/m)} = f(\omega).$$

Это означает, что

$$g(\omega) = \frac{\tilde{K}_1(\omega)}{\tilde{K}_1\left(\frac{\omega}{m}\right)} g\left(\frac{\omega}{m}\right) = \frac{\tilde{K}_1(\omega)}{\tilde{K}_1\left(\frac{\omega}{m}\right)} \quad \frac{\tilde{K}_1\left(\frac{\omega}{m}\right)}{\tilde{K}_1\left(\frac{\omega}{m^2}\right)} g\left(\frac{\omega}{m^2}\right) \quad = \frac{\tilde{K}_1(\omega)}{\tilde{K}_1\left(\frac{\omega}{m^2}\right)} g\left(\frac{\omega}{m^2}\right).$$

Продолжая эти преобразования, легко показать, что для любого ω и и для любого N справедливо равенство

$$g(\omega) = \tilde{K}_1(\omega) \frac{g(\omega/m^N)}{\tilde{K}_1(\omega/m^N)}.$$

Поскольку мы ищем только те решения, которые стремятся к 1 при стремлении аргумента к нулю, то, переходя в последнем равенстве к пределу при $N \to \infty$, получим $g(\omega) = \tilde{K}_1\omega$, что и требовалось доказать.

6. Численное решение уравнения (6) может быть основано не только на формуле (8). Возможны и другие алгоритмы. Например, если прологарифмировать уравнение (6) и аппроксимировать $\ln[f(\omega)]$ многочленом

$$a_1 \cdot \omega + a_2 \cdot \omega^2 + a_3 \cdot \omega^3 + \ldots + a_n \cdot \omega^n,$$

то решение имеет вид

$$\ln[\tilde{K}_1(\omega)] = \frac{a_1 \cdot \omega}{1 - 1/m} + \frac{a_2 \cdot \omega^2}{1 - 1/m^2} + \frac{a_3 \cdot \omega^3}{1 - 1/m^3} + \ldots + \frac{a_n \cdot \omega^n}{1 - 1/m^n}.$$

Вопросы, связанные с численным решением уравнения (6), и конкретные приложения предлагаемого метода восстановления тонкой структуры спектров будут изложены в следующей публикации.

Выводы

1. В общепринятых процедурах восстановления тонкой структуры спектров не учитывается тот факт, что угловое распределение исследуемых частиц отличается от углового распределения частиц, моделирующих δ-образное воздействие на спектрометр. Это приводит к принципиально неустранимым ошибкам в определении аппаратной функции спектрометра, а в силу математической некорректности решаемой задачи — к непредсказуемой потере точности в решении.

2. В настоящей работе предлагается метод восстановления тонкой структуры спектров, свободной от названного недостатка. Метод состоит в том, чтобы дважды зарегистрировать один и тот же спектр. Аппаратная функция спектрометра во втором случае имеет тот же самый вид, что и в первом случае, но сжата по оси абсцисс в m раз. Фурье-образ истинного спектра при данном методе имеет вид

$$\tilde{z}(\omega) = m \cdot \tilde{u}_2(\omega) \frac{m \cdot \tilde{u}_2(\omega/m)}{\tilde{u}_1(\omega/m)} \frac{m \cdot \tilde{u}_2(\omega/m^2)}{\tilde{u}_1(\omega/m^2)} \frac{m \cdot \tilde{u}_2(\omega/m^3)}{\tilde{u}_1(\omega/m^3)} \cdot \ldots,$$

где $\tilde{u}_1(\omega)$ и $\tilde{u}_2(\omega)$ — фурье-образы первого и второго зарегистрированных спектров.

3. Данное решение существует (т.е. выражение сходится) и является единственным с точностью до постоянного численного множителя.

Список литературы

[1] *Mularic W.M., Peria W.T.*// Surf. Sci. 1971. Vol. 26. N 1. P. 125–141.

[2] *Тихонов А.Н., Гончаровский А.В., Степанов В.В., Ягола А.Г.* Регуляризирующие алгоритмы и априорная. М.: Наука, 1979. 285 с.

[3] *Palmberg P.W.* // J. Vac. Sci. Thechnol. 1975. Vol. 12. N 1. P. 397–401.

[4] *Алешков Ю.З., Смышляев П.П.* Теория функций комплексного переменного и ее приложения. Л., 1986.

Рязанский педагогический
институт им.С.А. Есенина

Поступило в Редакцию
12 июля 1993 г.