

文章编号: 1007-4627(2006)01-0062-04

蒙特卡罗方法在低能电子致原子内壳层 电离截面测量中的应用*

吴 英, 安 竹

(四川大学辐射物理及技术教育部重点实验室, 四川大学原子核科学技术研究所, 四川 成都 610064)

摘 要: 在 Monte Carlo 方法模拟 keV 电子碰撞薄膜/厚衬底靶过程中, 输入材料数据中采用的内壳层电离截面数据不同, 得到的反映膜厚及衬底对电离截面测量结果影响的修正因子值也有差别。讨论了 Monte Carlo 模拟得到的修正因子值受输入材料数据中内壳层电离截面影响的程度, 并完成了入射 keV 电子在法拉第筒中逃逸率的估算工作。

关键词: 内壳层电离截面; Monte Carlo 模拟; 修正因子

中图分类号: TL99 **文献标识码:** A

1 引言

鉴于电子致原子内壳层电离截面测量在理论研究和实际应用中有着重要的意义, 及目前低能电子(电离阈能——几十 keV 能区)致原子内壳层电离截面数据还很缺乏的现状^[1], 近年来本课题组一直从事 keV 电子致原子内壳层电离截面测量的研究工作。在该工作中, 我们采用在厚衬底(如 Al)上镀薄膜的方法制作靶样品, 以避免制作自支撑薄靶的困难^[1]。由于入射电子在靶薄膜中的多次散射、在衬底上的背散射及致韧辐射会对测量结果产生影响, 即 Si(Li)探测器所记录的特征 X 射线会有所增加, 因而导致所测电离截面数据有所增大。最近我们用 Monte Carlo 方法模拟了实验条件下电子在靶样品中的输运过程, 得到了膜厚与衬底存在对内壳层电离截面测量值的修正量^[2]。Campos 等^[3]用修正因子表示膜厚与衬底对内壳层电离截面测量值的影响, 但未进一步讨论由 Monte Carlo 方法得到的修正因子对输入材料数据中内壳层电离截面数据选用的依赖。本工作深入讨论了 Monte Carlo 方法模拟时输入材料数据中采用不同的内壳层电离截面数据对算得的修正因子大小的影响。此外, 本文还通过对入射 keV 电子在实验所用法拉第筒中的

Monte Carlo 模拟得到了电子逃逸率的估算值。通过以上工作, 可提高对实验数据的处理精度。

本文首先简要介绍我们的实验方法, 然后以 13—25 keV 电子碰撞 Au 薄膜厚为 11.1 $\mu\text{g}/\text{cm}^2$ (~ 5.7 nm) 的 Au/Al 样品及 5—23 keV 电子碰撞 Ag 薄膜厚为 9.3 $\mu\text{g}/\text{cm}^2$ (~ 8.9 nm) 的 Ag/Al 样品为例, 讨论 Monte Carlo 方法算得的修正因子对输入材料数据中内壳层电离截面数据的依赖情况, 及 Monte Carlo 模拟得到的法拉第筒电子逃逸率。

2 实验方法

测量电子碰撞原子内壳层电离截面实验的详细描述可参见文献[4], 这里我们仅做简要介绍。

低能入射电子束由电子枪提供, 电子束电荷经法拉第筒收集, 由束流积分仪记录。实验所用靶是由真空镀膜技术将靶材料均匀蒸至厚衬底(如 Al)表面, 靶薄膜厚度一般为 ~ 10 $\mu\text{g}/\text{cm}^2$ 左右。靶膜厚度可由 RBS 技术获得。入射电子束垂直入射至沿水平方向倾斜 10° 的靶表面, 用于收集 X 射线谱的 Si(Li)探测器置于与水平面成 20° 方向处。靶室内真空保持在 $1.333\ 32 \times 10^{-3}$ Pa 左右。靶样置于法拉第筒底部, 法拉第筒以铝为材料, 顶端开有圆

收稿日期: 2005 - 05 - 11

* 基金项目: 国家自然科学基金委员会与中国工程物理研究院联合基金资助项目(10276029); 高等学校博士学科点专项科研基金资助项目(20020610019)

作者简介: 吴 英(1969—), 女(汉族), 新疆石河子人, 博士研究生, 从事辐射物理研究; E-mail: wy8862@sina.com

孔以便电子束入射,侧壁开有一圆孔以便于 Si(Li) 探测器收集 X 射线谱。图 1 为本课题组实验用法拉第筒截面图。

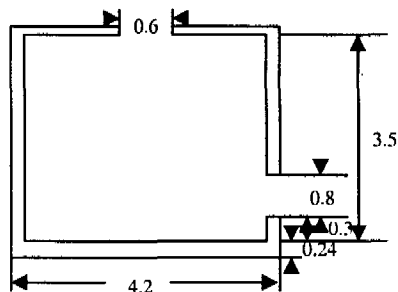


图 1 实验用法拉第筒截面图

(单位为 cm, 侧壁及上壁厚均为 0.1 cm, 其它见图示)

3 Monte Carlo 在实验中的应用

3.1 测量数据的修正

由于入射电子在靶膜中的多次散射、在衬底上的背散射及韧致辐射光子会对靶原子的电离有贡献,使得特征 X 射线有计数增加量 ΔN 。显然,在由特征 X 射线峰净计数 N 计算相应内壳层电离截面时应将 ΔN 从 N 中扣除。定义修正因子 K 为 ΔN 与 N 的比值,则由 Si(Li) 探测器收集到的特征 X 射线峰净计数 N 得到相应内壳层特征 X 射线产生截面的计算公式为

$$\sigma(E_c) = \frac{4\pi A(1-K(E_c))}{N_A d N_e \epsilon(E_{ph}) \Omega} N(E_c), \quad (1)$$

式中, E_c 为入射电子能量, A 为靶原子质量数, E_{ph} 为所发特征光子能量, N_A 为阿夫伽德罗常数, d 为靶膜质量厚度, N_e 为入射电子数, $\epsilon(E_{ph})$ 和 Ω 分别为 Si(Li) 探测器的探测效率及所张立体角。

反映膜厚及衬底的存在对电离截面综合贡献的修正因子 K 可由 Monte Carlo 程序 PENELOPE^[5] 采用如下方式计算得到:

由程序 PENELOPE 模拟可得到靶样品背散射光谱中的特征 X 射线峰计数 N_{MC} , 由此可算出靶薄膜元素的特征 X 射线产生截面的 Monte Carlo 计算值:

$$\sigma_{MC} = \frac{2A}{N_e N_A d} N_{MC}, \quad (2)$$

式中 A , N_e , N_A 和 d 的意义同(1)式。

同时,由 PENELOPE 程序材料数据库中使用

的电子致靶原子内壳层电离截面数据和原子参数值(荧光产额、Coster-Kronig 跃迁几率和 X 射线分支比)可算出靶原子 L_a , L_β , L_γ , L_1 , L_2 和总 L 壳层 X 射线产生截面^[6](K 壳层特征 X 射线产生截面就是 K 壳层电离截面值同荧光产额的乘积):

$$\sigma_{L_a, th} = \frac{\Gamma_{L_3-M_{4,5}}}{\Gamma_3} \omega_3 \cdot [\sigma_{L_3} + \sigma_{L_2} f_{23} + \sigma_{L_1} (f_{13} + f_{12} f_{23})], \quad (3)$$

$$\sigma_{L_\beta, th} = \frac{\Gamma_{L_3-N_{1,4,5}} + \Gamma_{L_3-O_{1,4,5}} + \Gamma_{L_3-P_1}}{\Gamma_3} \omega_3 [\sigma_{L_3} + \sigma_{L_2} f_{23} + \sigma_{L_1} (f_{13} + f_{12} f_{23})] + \frac{\Gamma_{L_2-M_1}}{\Gamma_2} \omega_2 (\sigma_{L_1} f_{12} + \sigma_{L_2}) + \frac{\Gamma_{L_1-M_{2,3}}}{\Gamma_1} \omega_1 \sigma_{L_1}, \quad (4)$$

$$\sigma_{L_\gamma, th} = \frac{\Gamma_{N_{2,3-L_1}} + \Gamma_{O_{2,3-L_1}}}{\Gamma_1} \sigma_{L_1} \omega_1 + \frac{\Gamma_{N_{1,4-L_2}} + \Gamma_{O_{1,4-L_2}}}{\Gamma_2} (\sigma_{L_1} f_{12} + \sigma_{L_2}) \omega_2, \quad (5)$$

$$\sigma_{L_1, th} = \frac{\Gamma_{M_1-L_3}}{\Gamma_3} (\sigma_{L_1} f_{13} + \sigma_{L_1} f_{12} f_{13} + \sigma_{L_2} f_{23} + \sigma_{L_3}) \omega_3, \quad (6)$$

$$\sigma_{L_2, th} = \frac{\Gamma_{M_1-L_2}}{\Gamma_{21}} \sigma_{L_2} \omega_2 + \frac{\Gamma_{M_1-L_2}}{\Gamma_2} \sigma_{L_1} f_{12} \omega_2, \quad (7)$$

$$\sigma_{L_3, th} = \omega_3 [\sigma_{L_3} + \sigma_{L_2} f_{23} + \sigma_{L_1} (f_{13} + f_{12} f_{23})] + \omega_2 (\sigma_{L_2} + \sigma_{L_1} f_{12}) + \omega_1 \sigma_{L_1}, \quad (8)$$

(3)~(8)式中, σ_{L_i} 是 L_i 支壳层电离截面; ω_i 是 L_i 支壳层荧光产额; f_{12} , f_{13} 和 f_{23} 是 Coster-Kronig 跃迁几率; Γ_{ij} , Γ_i 是 X 射线分支比。(3)~(8)式中没有考虑 K 壳层空位对 L 壳层 X 光产生截面的影响。当入射电子能量大于 K 壳层阈能时,则需在上面各式中加上 K 壳层空位的相应贡献^[7,8]。

这样, K 因子即可由下式得到:

$$K = \frac{\sigma_{MC} - \sigma_{th}}{\sigma_{MC}}. \quad (9)$$

Monte Carlo 方法是以概率统计理论为基础的一种数值计算方法,其计算结果的可靠性和准确性很大程度上依赖输入材料数据的准确度。本工作采用的 PENELOPE 程序^[5]是适于模拟低能光、电子运输的最新版本的 Monte Carlo 程序。为了观察模拟算得的修正因子 K 对输入材料数据中内壳层电离截面数据库的依赖程度,以 13—25 keV 电子碰

撞 Au 薄膜厚为 $11.1 \mu\text{g}/\text{cm}^2$ ($\sim 5.7 \text{ nm}$) 的 Au/Al 样品及 5—23 keV 电子碰撞 Ag 薄膜厚为 $9.3 \mu\text{g}/\text{cm}^2$ ($\sim 8.9 \text{ nm}$) 的 Ag/Al 样品为例, 我们将 PENELOPE 程序材料数据库中经典光学数据模型

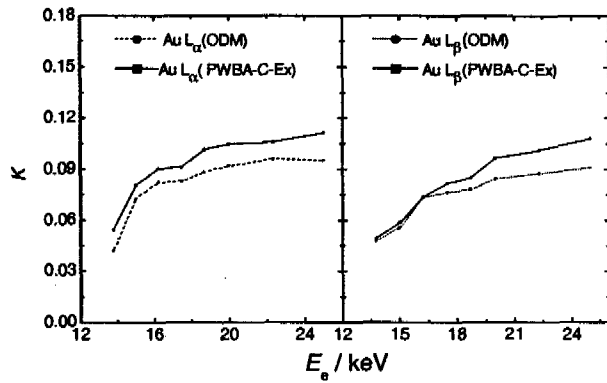


图 2 采用不同内壳层电离截面模拟 13—25 keV 电子碰撞 $11.1 \mu\text{g}/\text{cm}^2$ Au/Al 得到的 Au-L $_{\alpha}$ 和 Au-L $_{\beta}$ 产生截面修正因子

ODM^[9]的内壳层电离截面数据用 PWBA-C-Ex 理论模型^[10, 11]数据替代, 将相同实验条件下模拟得到的 K (ODM)与 K (PWBA)进行比较, 如图 2—图 3 所示。结果表明, 修正因子 K 主要取决于入射电子能量及靶材料特征, 对输入材料数据中内壳层电离截面数据只有少许的依赖: 对 Au-L $_{\alpha}$ 和 Au-L $_{\beta}$, 输入材料数据中分别采用 PWBA-C-Ex 理论模型数据和经典光学数据模型, 算得的修正因子 K 最

大差异为 $\sim 1.62\%$ 和 $\sim 1.69\%$; 而对 Ag-L, 算得的修正因子 K 最大差异为 $\sim 2.86\%$ 。引起差异的原因是基于 PWBA-C-Ex 模型的电子致靶原子内壳层电离截面数据随入射电子能量 E_0 的变化趋势不同于 ODM 模型。图 4 为二者变化趋势的比较图。可以看出, 无论 Au-L $_{\alpha}$, Au-L $_{\beta}$, 还是 Ag-L, ODM 模型和 PWBA-C-Ex 模型的电子致靶原子内壳层电离截面数据随入射电子能量 E_0 的变化趋势差异显著, 而得到修正因子 K 仅稍有不同, 这说明修正因子 K 对输入材料数据中的内壳层电离截面数据依赖性不大。

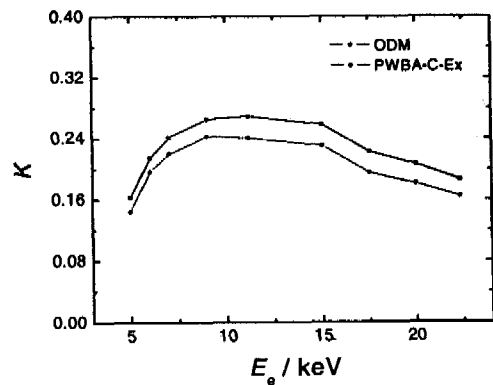


图 3 采用不同内壳层电离截面模拟 5—23 keV 电子碰撞 $9.3 \mu\text{g}/\text{cm}^2$ Ag/Al 得到的 Ag-L 产生截面修正因子

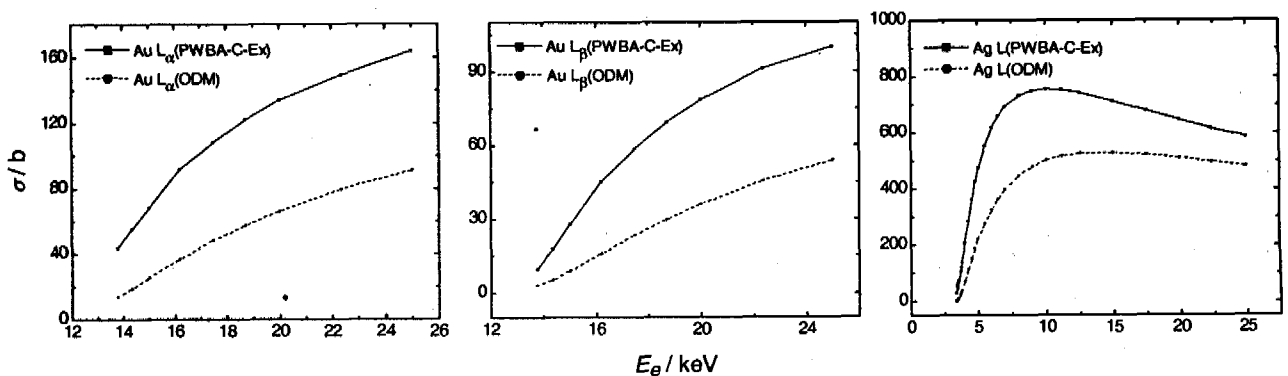


图 4 Monte Carlo 模拟中所用 PWBA-C-Ex 模型及 ODM 模型的 Au-L $_{\alpha}$, Au-L $_{\beta}$ 和 Ag-L 产生截面随入射电子能量 E_0 的变化趋势比较

3.2 法拉第筒计数误差计算

图 1 中, 法拉第筒的顶端和侧壁分别开有一圆孔, 由此会引起电子的逃逸。由于所考虑的系统形状复杂, 逃逸数的大小难以用一般数值方法求解。电子在法拉第筒中逃逸率的计算由 Monte Carlo 方

法 PENELOPE 程序^[5]完成: 建立符合法拉第筒几何特征的系统文件, 系统的几何特征描述借助于 PENELOPE 程序的子程序包 PENEGEOM 完成。通过模拟足够多的入射电子在法拉第筒中的输运过程, 以获得顶孔及侧孔引起的逃逸率。本工作我们

分别计算了能量为 20 和 100 keV 的入射电子在实验用法拉第筒中的输运过程,得到的逃逸率依次为 0.294% 和 0.283%。这表明,对 keV 能量的入射电子,本课题组实验用的法拉第筒电子逃逸率约为 0.3%。所以本课题组所用的法拉第筒因结构设计而造成的电子逃逸计数对实验结果影响不大。

4 结论

(1) Monte Carlo 方法模拟计算修正因子时,输入材料数据中的电子致原子内壳层电离截面数据

分别采用 PWBA-C-Ex 理论模型和经典光学数据 ODM 理论模型,得到相同实验条件下截面修正因子值约有 ~2% 左右的差异。总之, Monte Carlo 方法模拟得到的截面修正因子受输入材料数据中的电子致原子内壳层电离截面数据影响不大。

(2) Monte Carlo 方法模拟 keV 能量的入射电子在本课题组实验用法拉第筒中的输运过程,发现电子在其中的逃逸率约为 0.3%。

上述结论有助于我们更好地处理实验测得的电离截面数据。

参考文献:

- [1] An Zhu, Liu Mantian, Tang Changhuan, *et al.* 原子核物理评论, 2003, **20**(4): 268.
- [2] Wu Y, An Z, Liu M T, *et al.* J Phys, 2004, **B37**: 4 527.
- [3] Campos C S, Vasconcellos M A Z, Llovet X, *et al.* Phys Rev, 2002, **A66**: 012719.
- [4] 唐昶环. 电子致原子内壳层电离截面测量的新方法 & 新结果. 成都: 四川大学原子核科学技术研究所, 2000.
- [5] Salvat F, Fernandez-Varea J M, Acosta E, *et al.* PENELOPE, A Code System for Monte Carlo Simulation of Electron and Photon Transport. Paris: NEA/NSC/DOC (2001) 19, 2001.
- [6] Tirasoglu E, Cevik U, Ertugrul B, *et al.* Radiation Physics and Chemistry, 2001, **60**: 11.
- [7] Puri S, Mehta D, Chand B, *et al.* Nucl Instr and Meth, 1993, **B83**: 21.
- [8] Ertugrul M. J Phys, 2003, **B36**: 2 275.
- [9] Mayol R, Salvat F. J Phys, 1990, **B23**: 2 117.
- [10] Khare S P, Saksena V, Wadehra J M. Phys Rev, 1993, **A48**: 1 209.
- [11] Khare S P, Wadehra J M. Can J Phys, 1996, **74**: 376.

Application of Monte Carlo Simulations in Measurement of Atomic Inner-shell Ionization Cross-sections by Low-energy Electron Impact*

WU Ying, AN Zhu

(Key Laboratory for Radiation Physics and Technology of Ministry of Education, Institute of Nuclear Science and Technology, Sichuan University, Chengdu 610064, China)

Abstract: The sensitivity of the correction factor, which describes the combined effect of finite film thickness and the thick substrate in the measurement of atomic inner-shell ionization cross-sections by low-energy electron impact, to the adopted ionization cross-sections in the Monte Carlo simulation is discussed. Moreover, the electron escape ratio from the Faraday cup in our experiment is also obtained by Monte Carlo method.

Key words: inner-shell ionization cross-section; Monte Carlo simulation; correction factor

* **Foundation item:** Joint Foundation, National Natural Science Foundation Commission of China and China Academy of Engineering Physics(10276029); Specialized Research Fund for the Doctoral Program of Higher Education (20020610019)