

# 采用薄靶方法测量低能电子致 Al, Ti, Cu, Ag, Au 元素 K 壳层电离截面与 L 壳层特征 X 射线产生截面\*

李博 李玲 朱敬军 林炜平 安竹†

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

(2022 年 1 月 23 日收到; 2022 年 5 月 11 日收到修改稿)

使用 5—27 keV 能量范围内的单能电子束轰击薄碳衬底上的薄 Al ( $Z = 13$ ), Ti ( $Z = 22$ ), Cu ( $Z = 29$ ), Ag ( $Z = 47$ ), Au ( $Z = 79$ ) 靶, 使用硅漂移型探测器 (SDD) 收集产生的特征 X 射线, 测量了 Al, Ti, Cu 的 K 壳层电离截面以及 Cu, Ag 和 Au 的 L 壳层特征 X 射线的产生截面, 并且使用蒙特卡罗 PENELOPE 程序对实验结果进行了修正. 本文给出了 Cu 的 L 壳层特征 X 射线产生截面. 与半相对论扭曲波玻恩近似 (semi-relativistic distorted-wave Born approximation, DWBA) 理论值相比, 本文的大多数实验值在 7% 的范围内与理论值符合. 研究表明, 中重元素的 L 壳层电离截面的理论计算以及相应的原子参数有待更精确的确定.

**关键词:** 原子内壳层电离, 特征 X 射线, 截面, 蒙特卡罗模拟

**PACS:** 34.80.Dp, 02.70.Uu

**DOI:** 10.7498/aps.71.20220162

## 1 引言

入射电子与靶原子相互作用过程中会产生弹性和非弹性碰撞. 当入射电子能量高于靶原子内壳层电子的结合能时, 内壳层电子会发生电离, 外层电子向内填补空穴, 从而发射特征 X 射线. 研究电子束入射引起的原子内壳层电离对理解电子与原子的碰撞过程具有重要意义. 此外, 精确的内壳层电离截面数据可用于电子探针显微分析 (electron-probe micro-analysis, EPMA)、固体表面俄歇电子能谱 (Auger-electron spectroscopy, AES)、电子能量损失光谱 (electron energy-loss spectroscopy, EELS)、等离子体物理、大气物理和天体物理以及医学物理等领域<sup>[1,2]</sup>.

电子碰撞原子内壳层电离截面的测量工作在

理论和实验上已经有了大量的研究. 1926 年, Born<sup>[3]</sup> 提出了量子力学中的微扰理论, 引入玻恩近似法用于解决高能入射粒子的散射问题. 之后, 在 20 世纪六七十年代, 有许多研究人员使用平面波玻恩近似 (plane-wave Born approximation, PWBA) 对非弹性电子-原子散射截面进行了大量理论计算<sup>[4,5]</sup>. 平面波理论在入射电子能量较高时给出了相当好的积分截面. 此外, 如果动量传递很小且入射能量足够高, PWBA 理论的小角度微分截面的形状也相当好<sup>[6]</sup>. 然而, PWBA 理论在入射电子能量较低时 (如低于几倍的内壳层电离阈能), 计算结果与实验测量到的截面数据对比相差很大. 这是因为 PWBA 本质上是一阶微扰理论, 没有考虑靶原子对入射电子的库仑效应、入射电子和束缚电子之间的交换效应, 以及入射电子接近靶原子时对核外电子的极化效应<sup>[7]</sup>. 后来, Rainer<sup>[7]</sup> 使用一个简

\* 国家自然科学基金 (批准号: 12175158) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: anzhu@scu.edu.cn

单的库仑修正 (PWBA-C), 使轻粒子 (电子、正电子) 碰撞靶原子的 K 壳层电离截面计算结果得到了显著改进; 然后又引入 Ochkur 近似对电子交换过程进行了简单但合理的描述 (PWBA-Ex), 从而给出了包含库仑效应和交换效应修正的平面波玻恩近似理论模型 (PWBA-C-Ex).

早在 20 世纪三十年代, 就有学者使用了扭曲波 (distorted-wave, DW) 近似来处理电子散射问题. 但是 DW 近似需要进一步的近似才更方便计算, 而这导致了其计算结果比 PW 近似计算更大的误差. 所以, 直到六七十年代现代计算机出现后, 人们才重新对这种近似感兴趣<sup>[6]</sup>. 随后, 一些研究人员发展了扭曲波玻恩近似 (distorted-wave Born approximation, DWBA) 理论模型用于描述多电荷离子激发的近似计算<sup>[8-10]</sup>. 在理论工作方面, 此前一直没有人发展一个完整的 DW 理论用以处理电子-原子散射的多粒子体系问题. 直到 21 世纪初, Segui 等<sup>[11]</sup> 首次将 DWBA 模型应用于中性原子内壳层电离的相关截面计算. 早期的 DWBA 模型中, 为了简化计算, 依然是忽略了电荷交换效应的影响<sup>[8]</sup>. Segui 等<sup>[11]</sup> 和 Colgan 等<sup>[12]</sup> 分别提出的半相对论和相对论 DWBA 理论考虑了入射与出射电子波函数受到靶原子场的作用引起的扭曲效应和交换效应. Segui 等<sup>[11]</sup> 的半相对论 DWBA 模型适用于入射粒子动能在 10 倍电离阈能以下的情形. 中性原子因电子或正电子碰撞而产生的内壳层电离的微分截面和总截面的计算结果与实验数据在 10% 左右以内保持了很好的一致性. Colgan 等<sup>[12]</sup> 用相对论 DWBA 模型对 Mn, Fe, Ni, Cu 的 K 层电离截面的计算结果与实验测量值符合很好, 对 W 的 L 壳层电离截面的计算结果也基本在实验误差范围内与实验数据符合. 并且, 他们的研究表明, 与半相对论 DWBA 计算结果相比, 相对论 DWBA 计算与实验测量结果的一致性更好<sup>[12]</sup>. 之后, Bote 和 Salvat<sup>[13]</sup> 结合 PWBA 与 DWBA 理论, 提出了一种计算方案, 用于精确计算宽能量范围的蒙特卡罗模拟所需的电离截面. 他们使用这种方案生成了一个电子和正电子入射的 K, L 和 M 壳层电离截面数据库, 能量范围直到 1 GeV, 元素范围从 H ( $Z = 1$ ) 到 Es ( $Z = 99$ ).

在实验方面, 2014 年 Llovet 等<sup>[14]</sup> 对有关 K, L, M 壳层电离截面与特征 X 射线产生截面的测量与理论计算方法进行了系统的整理, 并对实验结果

和理论计算结果进行了总结与分析. 至今测得的原子内壳层电离截面数据依然不完整, K 壳层数据最多, L 壳层很少, M 壳层更是寥寥无几. 1981 年, Shima 等<sup>[15]</sup> 首次给出了在入射电子能量为 1.03—2.2 倍电离阈能下 Au 的  $L_3$  子壳层的电离截面. 1983 年, Shima 等<sup>[16]</sup> 又使用低能电子 ( $< 30$  keV) 轰击纯金属厚靶测量了高  $Z$  元素 ( $Z = 50—82$ ) 的  $L\alpha$  子壳层 X 射线产额. 在 Shima 之前, 很少有使用电子束测量 L 壳层 X 射线产额的研究 (多是测量 K 壳层)<sup>[16]</sup>. 近年来, Llovet 等<sup>[17-19]</sup> 使用低能电子 (几到几十 keV) 入射带有薄 C 衬底的薄靶或纯厚靶测量了  $Z = 6—82$  之间多种元素的 K 壳层电离截面或 L 壳层特征 X 射线产额, 以及 Pb 的 M 壳层特征 X 射线产生截面. 2016 年, Qian 等<sup>[20]</sup> 研究了一种由多层超排列碳纳米管阵列组成的碳栅极作为衬底的薄靶, 测量了 Al 的 K 壳层电离截面和 W 的 L, M 壳层 X 射线产生截面, 结果与 DWBA 理论值符合良好. 最近, Liang 等<sup>[21]</sup> 采用厚靶的方法首次测量了 4—9 keV 正电子碰撞 Al 靶的 K 壳层电离截面. 总的来看, K 壳电离截面实验值与理论值符合得较好, L 壳电离截面和特征 X 射线产生截面实验值与理论值符合得不能令人满意, 特别是一些中重元素 (如 Ga ( $Z = 31$ ), Ge ( $Z = 32$ ) 和 As ( $Z = 33$ ))<sup>[22,23]</sup>.

20 世纪末, 在本研究组早期的相关研究中, 使用单能电子束入射厚衬底薄靶的方法, 测量了 Ni, Cr, Cu 和 Co 的 K 壳层电离截面<sup>[24,25]</sup>. 近几年, Zhao 等<sup>[2,26,27]</sup> 又使用这种方法测量了 In, Sn, Te, Os, Ir, Pt 等元素的 L 和 M 壳层特征 X 射线产生截面. 使用厚衬底薄靶的方法避免了制备自支撑薄靶或薄衬底薄靶的困难, 但需要对入射电子在厚衬底上的背散射影响, 以及轰击厚衬底产生的韧致辐射影响进行修正. Zhao 等<sup>[2,26,27]</sup> 修正后的 L 和 M 壳层特征 X 射线产生截面在误差范围内与 DWBA 和 PWBA-C-Ex 理论值符合得较好. 在 2009 年及之后的部分截面测量工作中, 本小组使用的是电子束轰击纯金属厚靶的方法<sup>[28-31]</sup>. 该方法不涉及样品厚度的测量, 避免了薄靶的制备以及厚度测量误差等问题. Zhu 等<sup>[28]</sup>、Zhao 等<sup>[29]</sup>、Wu 等<sup>[30]</sup> 和李颖涵等<sup>[31]</sup> 陆续使用电子束轰击纯金属厚靶的方法测量了 Al, Si, Ti, Zr, Ag, W, Au, Pb, Bi 等元素的特征 X 射线产生截面. 入射电子能量为电离阈能的 5—6 倍时, 这种厚靶方法测得的电子轰击低、中

Z元素原子的内壳层电离截面或特征 X 射线产生截面的实验精度可以达到与薄靶测量相同的水平.

薄衬底薄靶的方法虽然靶的制备困难,但可以避免厚衬底因素带来的较大的修正系数. 随着制靶技术的发展,本文也尝试使用薄衬底薄靶方法. 另外,本文采用带有超薄窗的 SDD 探测器,可以研究中重元素的 L 壳特征 X 射线产生截面(如本文研究的 Cu 元素). 本文使用了单能电子束(5—27 keV)入射薄 C( $Z = 6$ )衬底薄靶的方法,测量了 Al( $Z = 13$ ), Ti( $Z = 22$ )和 Cu( $Z = 29$ )的 K 壳层电离截面,以及 Cu( $Z = 29$ ), Ag( $Z = 47$ )和 Au( $Z = 79$ )的 L 壳层特征 X 射线的产生截面. 在使用蒙特卡罗模拟程序 PENELOPE 对入射电子进行背散射与多次散射效应修正之后,将实验结果与 DWBA 理论值进行了对比分析. 本文第 2 节介绍实验装置,第 3 节是 PENELOPE 模拟,第 4 节是实验结果与分析,第 5 节给出了结论.

## 2 实验

### 2.1 实验装置

本实验采用的装置与 Li 等<sup>[32]</sup>的相同,如图 1 所示. 法拉第筒(内径 40 mm,筒高 69 mm,壁厚 5 mm)、靶和探测器等均放置于北京中科科仪股份有限公司(中科科仪)生产的 KYKY-2800 B 型扫描电子显微镜(scanning electron microscope, SEM)的真空靶室中. 真空度小于  $3 \times 10^{-3}$  Pa. 单能电子束由扫描电子显微镜中加热的灯丝发射出来,通过电场的加速、聚焦并垂直穿过法拉第筒顶部的小孔,轰

击与入射电子束成  $45^\circ$  放置的薄靶. 铜制的法拉第筒壁厚 5 mm,能有效地阻止高能韧致辐射光子的穿透. 另外,在法拉第筒底部放置一个深度约 30 mm 的铝制圆筒(相当于将法拉第筒加深),并放置一块中心开口直径约 5 mm 的碳膜,从而尽可能降低法拉第筒底部的杂散射线对探测器收集到的 X 射线的影响. 在法拉第筒的顶孔和侧孔间同时设有  $-100$  V 的偏压,以阻止能量小于 100 eV 的电子逃逸. 能量大于 100 eV 的电子的逃逸率通过蒙特卡罗程序 PENELOPE 模拟计算. 电子束流经法拉第筒被 ORTEC 439 数字电流积分器收集,然后由定标器记录,其电荷测量精度优于 1%. 相对于入射电子束,靶倾斜  $45^\circ$ ,X 射线发射角度为  $90^\circ$ . 实验中使用的 X 射线探测器为美国 Amptek 公司生产的 XR-100 SDD 型硅漂移探测器,在其灵敏体积前有一个  $25 \text{ mm}^2$  的 C2 超薄窗口(由 40 nm  $\text{Si}_3\text{N}_4$  薄膜、30 nm Al 膜以及  $15 \mu\text{m}$  Si 网格组成),其对 5.9 keV  $^{55}\text{Mn}$   $\text{K}\alpha$  X 射线的标称能量分辨率为 125 eV. 使用带有 C2 超薄窗口的 XR-100 SDD 可以降低对低能 X 射线的吸收,并可以探测到低到硼  $\text{K}\alpha$  线(0.183 keV)的低能 X 射线. 实验中在探测器前方安装了由永磁铁构成的电子偏转器,以防止从法拉第筒侧孔出射的背散射电子进入 SDD 探测器. 利用 XR-100 SDD 探测器记录产生的光子信号,经过数字脉冲处理器(PX5)等电子学系统处理后,由 DppMCA 软件获取特征 X 射线能谱. 本次实验中使用的电子束流强较低,并且 SDD 具有高计数率的能力,所以实验死时间校正可以忽略不计( $<1\%$ ).

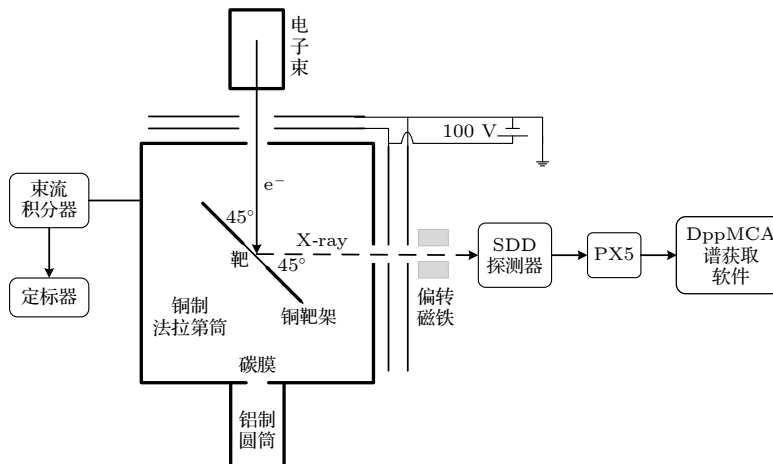


图 1 实验装置示意图

Fig. 1. The schematic of experimental setup.



本次实验用到的 5 种薄靶: Al ( $5.5 \mu\text{g}/\text{cm}^2$ ), Ti ( $28 \mu\text{g}/\text{cm}^2$ ), Cu ( $35.5 \mu\text{g}/\text{cm}^2$ ), Ag ( $44 \mu\text{g}/\text{cm}^2$ ), Au ( $44 \mu\text{g}/\text{cm}^2$ ), 均由中国原子能科学研究院制作. 靶框由碳材料制成, 直径为 18 mm, 厚度为 0.5 mm. 靶框中心一个直径 4 mm 的孔内是实验所用的薄靶, 采用电阻加热真空蒸发法<sup>[33]</sup>在 C 衬底上(质量厚度  $7 \mu\text{g}/\text{cm}^2$ ) 制备而成. 其中, C 和 Au 靶的原材料纯度(原子比)为 99.99%, Al, Ti, Cu 和 Ag 靶的纯度均达 99.9%. 碳是一种良好的导电导热材料, 具有较高的抗拉强度, 以碳作为靶框和衬底可以避免电荷在靶上的堆积. 此外, 碳的电子背散射系数较低, 在本文感兴趣的特征 X 射线谱上也不会显示它的特征峰. 因此, 选择碳作为衬底材料可以减小衬底对特征 X 射线谱测量的影响.

靶的标称厚度由制造商使用超微量天平 (XP2U, METTLER TOLEDO, Switzerland) 测量提供. 依托于四川大学新引进的 3 MV 串列静电加速器 (high voltage engineering europa, HVEE)<sup>[34]</sup>, 利用卢瑟福背散射方法 (Rutherford backscattering spectrometry, RBS) 测量了 5 种靶的厚度, 与称重法相比, 结果相差不超过 5.2%.

## 2.2 SDD 探测器效率刻度

探测器的效率刻度在特征 X 射线的定量测量中起着重要的作用. 本文的探测器效率刻度采用高能段 ( $>3.3 \text{ keV}$ ) 标准放射源刻度法与低能段 ( $<3.3 \text{ keV}$ ) 特征峰刻度法相结合, 该部分工作已在文献<sup>[32]</sup>中完成. 标准放射源刻度法即通过测量  $^{55}\text{Fe}$ ,  $^{57}\text{Co}$ ,  $^{137}\text{Cs}$  和  $^{241}\text{Am}$  点标准源衰变放出的特征 X 和  $\gamma$  射线来完成. 特征峰刻度法即通过测量 20 keV 电子轰击多种纯度大于 99.9% 的厚靶 (MgF<sub>2</sub>,

Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub>, WS<sub>2</sub>, CaF<sub>2</sub>, Ti 和 Mn) 产生的特征 X 射线光谱来完成, 通过特征 X 射线实验产额与蒙特卡罗模拟结果的比值得到 0.68—6 keV 间效率刻度曲线的相对值, 然后再将低能区的相对效率值归一化到使用标准源获得的高能区的绝对效率值, 最终得到低能区的绝对效率值. 探测器效率刻度的结果见图 2. 采用这种方法确定的效率刻度不确定度主要来自于标准源, 在本文所关注的能量范围内约为 1.6%. 实验刻度所得效率值与根据厂商提供的探测器参数计算出的效率曲线符合很好.

## 3 修正计算

### 3.1 堆积效应修正

核辐射事件是一种时间间隔服从泊松分布的随机过程. 在 X 射线的探测过程中, 探测器吸收的每个光子都会产生一个信号, 这个信号由脉冲处理电路成形之后到达多道分析仪, 产生一个计数. 探测系统的分辨时间定义为相邻两个脉冲被记录为独立事件的最小时间间隔. 当探测系统在分辨时间内检测到下一个信号时, 两个信号就会被记录为一个能量畸变的单独脉冲, 即产生脉冲堆积效应. 堆积效应会导致低能信号的计数减少, 高能信号的计数增加, 整个能谱发生畸变. 计数率越高, 堆积效应就越严重.

堆积效应的修正采用文献<sup>[35, 36]</sup>的方法, 本研究组编写了相应的堆积修正程序 PUC (pile-up correction). 使用示波器记录下 SDD 探测器输出的脉冲波形, 分别在高计数率和低计数率下测量两个 X 射线谱, 修改 PUC 程序设定的探测系统分辨时间, 直至校正后的高计数率 X 射线谱在形状上与低计数率 X 射线谱完全一致, 则得到探测系统的分辨时间, 并用于实验 X 射线谱的修正. 为了降低脉冲堆积效应, 在整个实验过程中始终保持较低的计数率 ( $<500 \text{ counts/s}$ ). 对所有实验谱进行堆积效应修正的结果表明, 该效应对测量谱的影响小于 1%.

### 3.2 PENELOPE 模拟

本文采用蒙特卡罗模拟来计算电子逃逸率和靶厚度及衬底的修正因子. 使用的蒙特卡罗模拟程序 PENELOPE 是一种通用 MC 程序, 它结合了数值和解析物理模型来描述电子和光子与

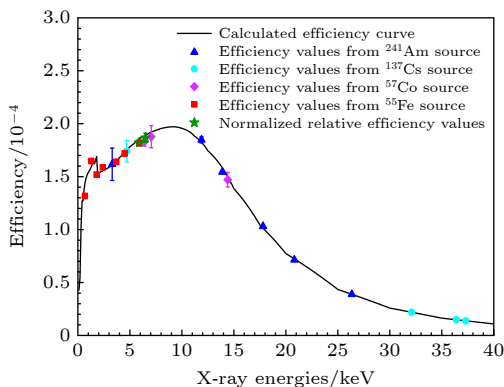


图 2 SDD 探测器的效率刻度曲线

Fig. 2. The X-ray detection efficiency of the SDD detector.

物质的相互作用<sup>[37]</sup>. PENELOPE 的算法用于模拟 50 eV—1 GeV 之间的电子或正电子和光子的输运, 其精度取决于粒子输运模型、不同相互作用的截面数据、原子的弛豫参数和复杂几何的描述. 蒙特卡罗方法的主要局限性就在于其随机性, 所有结果都与统计不确定性有关, 而减少不确定性的代价就是增加模拟抽样的次数和时间, 为此基于 MPI 环境对 PENELOPE 程序进行了并行化<sup>[32]</sup>. PENELOPE 程序从输入的材料数据文件中读取每个材料的物理参数. 材料数据文件是通过辅助程序 material 创建的, 该程序从 PENELOPE 数据库中提取所需的各种原子参数. PENELOPE 数据库中的电子碰撞电离截面是基于 Segui 等<sup>[11]</sup> 的 DWBA 理论计算得到的. 程序运行时创建的相空间文件 (psf) 中包含所有进入探测器的粒子的状态变量. 特征 X 射线或韧致辐射光子的计数也可以从相空间文件中提取出来. 本文在进行模拟计算时, 所有的几何参数均与实验保持一致.

### 3.2.1 电子逃逸率计算

实验中用于收集入射电子的法拉第筒顶部有一个直径 3.5 mm 的小孔, 用于通过入射电子束; 侧面有一个直径 10 mm 的小孔, 用于通过碰撞产生的光子. 背散射电子和二次电子从这两个小孔的逃逸会导致入射电子收集得不完全, 从而影响实验结果. 因此, 处理实验数据时需要入射电子数进行相应的修正.

根据实际使用的法拉第筒几何结构编写相应的几何文件, 使用 PENELOPE 计算了多种入射能量轰击 5 种靶的情况下, 能量高于 100 eV 的电子的逃逸率. 结果显示, 在本文关注的能量范围内, 不同入射能量和不同靶材的电子逃逸率约为 0.04%—2.05%. 能量越高, 靶原子序数越小, 则逃逸率越小.

### 3.2.2 靶修正因子计算

特征 X 射线的产生截面计算公式为

$$\sigma(E_c) = \frac{N_x(E_c)}{t \cdot N_A \cdot \frac{\varepsilon_{in} \cdot \Omega}{4\pi} \cdot N_e}, \quad (1)$$

其中,  $E_c$  是入射电子能量,  $N_x(E_c)$  是特征峰计数,  $t$  是靶的质量厚度,  $A$  是靶原子质量数,  $N_A$  是阿伏伽德罗常数,  $\Omega$  是探测器立体角,  $\varepsilon_{in}$  是探测器本征效率,  $N_e$  是入射电子数,  $\theta$  是入射电子束与靶表面

法线夹角. 探测器绝对效率  $\varepsilon_{in} \cdot \Omega / (4\pi)$  可由效率刻度曲线插值计算, 电子数  $N_e$  由数字电荷积分器收集的电荷计算, 并由电子逃逸率修正.

理论上特征 X 射线产生截面的测量, 需要入射电子与靶原子产生单次散射. 然而, 理想中的自支撑薄靶由于制备、运输和保存中有诸多困难, 很难达到理想状态. 本文使用的靶是带有薄碳衬底的薄靶, 当入射电子能量较低时, 电子穿过薄靶时发生的多重散射效应和能量损失, 以及在衬底上的背散射效应都会影响到特征 X 射线的峰计数  $N_x(E_c)$ , 从而导致截面的测量误差. 因此, 有必要对此进行修正.

计算中使用蒙特卡罗程序 PENELOPE 完全按照实验条件进行模拟, 得到了产生截面的模拟值  $\sigma_{MC}$ :

$$\sigma_{MC} = \frac{N_{MC}}{\frac{t \cdot N_A}{A \cdot \cos\theta} \cdot \frac{\Omega}{4\pi} \cdot N_e}, \quad (2)$$

其中,  $N_{MC}$  是根据 PENELOPE 产生的相空间文件中提取出的特征 X 射线的净计数, (2) 式中其他符号的含义与 (1) 式保持一致.

另外, 由 DWBA 理论计算出特征 X 射线产生截面的理论值  $\sigma_{th}$ . 对于结构简单的 K 壳层, 可直接从 PENELOPE 运行生成的材料文件中提取出对应靶元素的电离截面, 再乘上相应的荧光产额和 X 射线分支比, 即为对应的产生截面; 而 L 壳层较为复杂,  $L\alpha$ ,  $L\beta$ ,  $L\gamma$  和总的 L 壳层产生截面的计算公式如下:

$$\begin{aligned} \sigma_{L\alpha,th} &= F_{3\alpha}\omega_3 [\sigma_{L3} + \sigma_{L2}f_{23} + \sigma_{L1} (f_{13} + f_{12}f_{23})], \\ \sigma_{L\beta,th} &= F_{1\beta}\omega_1\sigma_{L1} + F_{2\beta}\omega_2 (\sigma_{L2} + \sigma_{L1}f_{12}) \\ &\quad + F_{3\beta}\omega_3 [\sigma_{L3} + \sigma_{L2}f_{23} + \sigma_{L1} (f_{13} + f_{12}f_{23})], \\ \sigma_{L\gamma,th} &= F_{1\gamma}\omega_1\sigma_{L1} + F_{2\gamma}\omega_2 (\sigma_{L2} + \sigma_{L1}f_{12}), \\ \sigma_{L,th} &= \omega_1\sigma_{L1} + \omega_2 (\sigma_{L2} + \sigma_{L1}f_{12}) + \omega_3 [\sigma_{L3} \\ &\quad + \sigma_{L2}f_{23} + \sigma_{L1} (f_{13} + f_{12}f_{23})], \end{aligned} \quad (3)$$

其中,  $\sigma_{Li}$  是  $Li$  子壳层电离截面,  $\omega_i$  是  $Li$  子壳层荧光产额,  $F_{ij}$  是  $Li$  子壳层 X 射线分支比 ( $i$  表示 1, 2, 3,  $j$  表示  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$ ),  $f_{12}$ ,  $f_{13}$ ,  $f_{23}$  是 Coster-Kronig 跃迁概率. 以上理论计算涉及的参数均提取自 PENELOPE 程序原子数据库 (基于 Lawrence Livermore 国家实验室 (LLNL) 评价原子数据库<sup>[38]</sup>), 具体数值见表 1—表 3.

表 1 靶原子 K 壳层荧光产额及 X 射线分支比 (提取自 PENELOPE 程序数据库)

Table 1. Fluorescence yields and X-ray branching ratios of K shell of target atoms (extracted from PENELOPE program database).

Elements	Fluorescence yields		X-ray branching ratios	
	$\omega_K$	$F_{K\alpha}$	$F_{K\beta}$	
Al	0.0371	0.9939	0.0061	
Ti	0.2135	0.8979	0.1021	
Cu	0.4338	0.8916	0.1084	

表 2 靶原子 L 壳层荧光产额及 Coster-Kronig 跃迁概率 (提取自 PENELOPE 程序数据库)

Table 2. Fluorescence yields and Coster-Kronig transition coefficients of L shell of target atoms (extracted from PENELOPE program database).

Elements	Fluorescence yields			Coster-Kronig transition coefficients		
	$\omega_{L1}$	$\omega_{L2}$	$\omega_{L3}$	$f_{12}$	$f_{13}$	$f_{23}$
Cu	0.0019	0.0092	0.0088	0.2402	0.5722	0.0089
Ag	0.0149	0.0547	0.0570	0.0921	0.6646	0.1604
Au	0.0823	0.3627	0.3183	0.0700	0.7034	0.1285

表 3 靶原子 L 壳层 X 射线分支比 (提取自 PENELOPE 程序数据库)

Table 3. X-ray branching ratios of L shell of target atoms (extracted from PENELOPE program database).

Elements	X-ray branching ratios					
	$F_{3\alpha}$	$F_{1\beta}$	$F_{2\beta}$	$F_{3\beta}$	$F_{1\gamma}$	$F_{2\gamma}$
Cu	0.4933	0.9430	0.4821	0.0121	0.0000	0.0131
Ag	0.8159	0.8391	0.8509	0.0814	0.1494	0.0862
Au	0.7822	0.7466	0.7989	0.1702	0.2227	0.1786

通过对比产生截面的理论值  $\sigma_{th}$  与模拟值  $\sigma_{MC}$ , 引入靶修正系数  $K$ :

$$K = \frac{\sigma_{th}}{\sigma_{MC}} \quad (4)$$

因此, 最终修正后得到的特征 X 射线产生截面  $\sigma$  为

$$\sigma = \sigma(E_e) \cdot K \quad (5)$$

## 4 结果与讨论

### 4.1 实验谱处理与分析

图 3 是入射能量为 25 keV 的单能电子束分别入射 5 种靶材产生的典型 X 射线谱. 在横坐标能量为 1.5 keV 处的峰是 Al 的 K 壳层特征 X 射线峰; 4.6, 5.0 keV 处的峰是 Ti 的  $K\alpha$ ,  $K\beta$  壳层特征 X 射线

峰; 1.0, 8.1, 8.9 keV 处的峰分别是 Cu 的 L,  $K\alpha$ ,  $K\beta$  壳层特征 X 射线峰; 3.1 keV 处的峰是 Ag 的 L 壳层特征 X 射线峰; 9.8, 11.5, 13.4 keV 处的峰分别是 Au 的  $L\alpha$ ,  $L\beta$ ,  $L\gamma$  壳层特征 X 射线峰. 特征 X 射线峰下面的虚线是扣掉的线性本底. 实验中的本底主要来自入射电子产生的韧致辐射. 此外, 在不放置靶膜的情况下, 探测到的电子束从空靶框穿过产生的辐射本底计数占相同入射电子数从靶膜上穿过产生的实验谱计数的比例小于 1%. 对比扣除本底的三种方法: 从模拟谱中提取韧致辐射谱扣本底; 对实验特征 X 射线峰附近平滑曲线部分进行拟合扣本底; 直接在特征 X 射线计数峰底部左右两端取点拉直线扣线性本底. 对比发现, 除了位于低能端的 Cu 的 L 壳层特征峰直接扣线性本底偏差略大外 (约 3%), 其余特征 X 射线峰使用三种不同的方法扣除本底, 峰的总计数偏差都小于 1% (特征 X 射线峰的计数远高于韧致辐射本底计数). 因此, 本文采用扣线性本底的方法对实验谱进行计数处理.

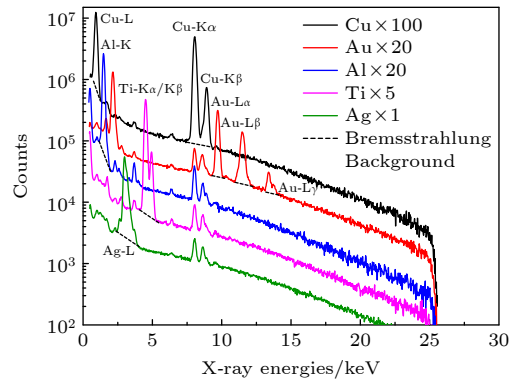


图 3 从上到下分别是能量为 25 keV 的电子束碰撞 Cu, Au, Al, Ti, Ag 5 种薄靶产生的 X 射线谱, 元素  $\times N$  中的  $N$  为对应谱放大倍数, 虚线是韧致辐射本底

Fig. 3. The experimental spectra for Cu, Au, Al, Ti, Ag target by 25 keV electron impact (from the top to the bottom).  $N$  in element  $\times N$  is the magnification of the corresponding spectrum. The dotted line is the bremsstrahlung background.

从图 3 的实验谱可以看出, Ti 的  $K\alpha$  和  $K\beta$  壳层特征 X 射线峰有明显的重叠部分, 因此, 采用 Origin 软件 (2017 版) 的高斯拟合功能对谱中两个特征峰进行拟合计算, 从而得出两峰各自的总计数. 除 Ti 的  $K\alpha$  和  $K\beta$  壳层特征峰外, 其他靶均采用对峰面积进行积分的方法计算特征峰的总计数.



图 3 中 25 keV 电子束入射的 Cu 的  $K\alpha$  和  $K\beta$  壳层特征 X 射线峰有微弱的重叠部分, 除此之外, Cu 在其他能量的电子束入射下  $K\alpha$  和  $K\beta$  两个峰完全可以区分开. Au 位于 2.2 keV 附近的 M 壳层特征 X 射线峰, 由于 M 壳层结构复杂, 另有其他杂峰干扰, 难以拟合提取峰面积, 因此本文不作讨论, 仅讨论分析 L 壳层的  $L\alpha$ ,  $L\beta$ ,  $L\gamma$  3 个特征峰. 受探测器分辨率所限制, Cu 和 Ag 的 L 壳层各能级无法区分开, 因此仅对 L 壳层做整体计算分析.

### 4.2 修正系数

理想情况下, 修正前的实验值  $\sigma(E_e)$ 、DWBA 理论值  $\sigma_{th}$  以及 PENELOPE 模拟值  $\sigma_{MC}$  应该有  $\sigma(E_e) \approx \sigma_{MC} > \sigma_{th}$  的数量关系. 实际上, 理论值  $\sigma_{th}$  确实是最小的, 这也符合对结果进行修正的初衷, 即修正入射电子在靶中的多次散射和在衬底上的背散射对产生截面的贡献. 根据 (4) 式算出的靶修正系数  $K$  的结果见图 4.  $K$  值越接近 1, 说明实验条件越理想. 图 4 中 Al 的 K 壳层修正系数是最符合预期的, 入射能量在 10 keV 时, 为 0.90, 入射能量升至 20 keV 及以上时,  $K$  值达到 0.98 及以上. 除 Al 之外, 图 4 中其余的修正系数曲线都有入射能量低的一端翘起的现象. 原因可能是相对于较高的入射能量, 靶厚和电子束的能量损失对入射能量较低时的实验结果影响更大: 对于本实验所用靶的厚度, 通过计算入射电子穿过靶后的能量损失发现, 入射能量为 5 keV 时, 电子穿过 Cu 靶的能量损失约为 15%, 而 Al 靶约为 3%, 当入射能量升至

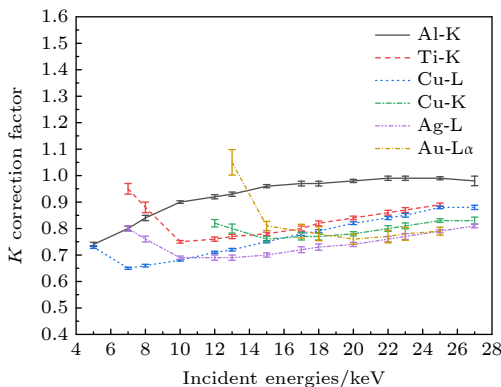


图 4 能量为 5—27 keV 的电子碰撞 5 种薄靶 K 壳层电离截面或 L 壳层特征 X 射线产生截面修正系数  
Fig. 4. The correction factors  $K$  for K shell ionization cross sections or L shell characteristic X-ray production cross sections of five thin targets with 5–27 keV electron impact.

10 keV 时, 电子穿过 Cu 靶和 Ag 靶的能量损失约为 5%, 此时, Ti 靶和 Au 靶约为 4%. 由于特征 X 射线产生截面在入射能量较低时随入射能量的降低而迅速变小, 因此, 较大的能量损失使得修正系数的分母 (即产生截面的模拟值) 比理论值降低更快, 从而造成修正系数在低入射能量时变大. Au 的  $L\beta$  和  $L\gamma$  与  $L\alpha$  的修正系数基本一致, 所以图 4 中只给出了  $L\alpha$  的修正系数.

### 4.3 截面测量结果与分析

最终的实验结果如图 5—图 10 所示. 其中, 图 5—图 7 分别为 Al, Ti 和 Cu 的 K 壳层电离截面, 图 8—图 10 分别为 Cu, Ag 和 Au 的 L 壳层产生截面. 具体的截面数值及误差见表 4 和表 5.

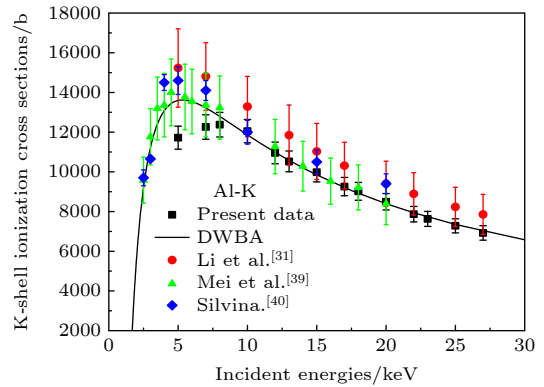


图 5 能量为 5—27 keV 的电子碰撞 Al 靶 K 壳层电离截面. 实心形状为实验值; 实线为 DWBA 理论值  
Fig. 5. The K shell ionization cross sections of Al target by 5–27 keV electron impact. The solid shapes are experimental values. The solid line is DWBA theoretical value.

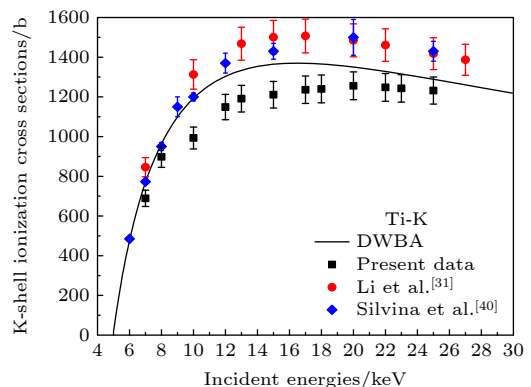


图 6 能量为 7—25 keV 的电子碰撞 Ti 靶 K 壳层电离截面. 实心形状为实验值; 实线为 DWBA 理论值  
Fig. 6. The K shell ionization cross sections of Ti target by 7–25 keV electron impact. The solid shapes are the experimental values. The solid line is DWBA theoretical value.

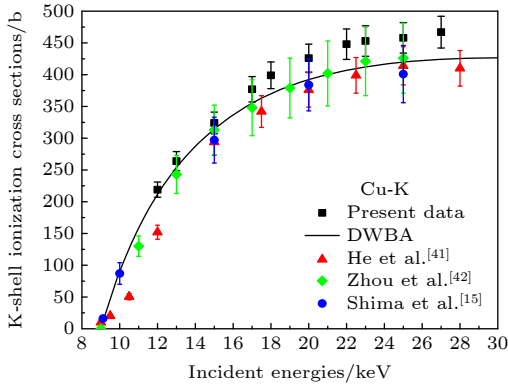


图7 能量为12—27 keV的电子碰撞Cu靶K壳层电离截面. 实心形状为实验值; 实线为DWBA理论值

Fig. 7. The K shell ionization cross sections of Cu target by 12–27 keV electron impact. The solid shapes are the experimental values. The solid line is DWBA theoretical value.

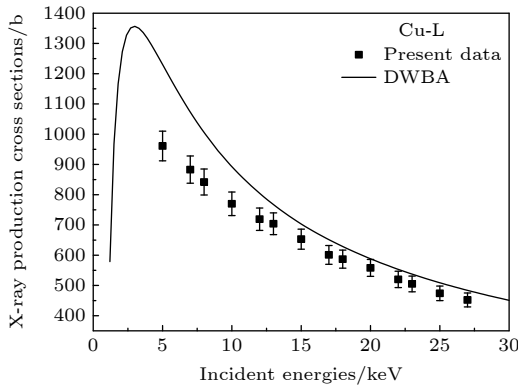


图8 能量为5—27 keV的电子碰撞Cu靶L壳层特征X射线产生截面. 实心方点为实验值; 实线为DWBA理论值

Fig. 8. The L shell characteristic X-ray production cross sections of Cu target by 5–27 keV electron impact. Solid squares are the experimental values. The solid line is DWBA theoretical value.

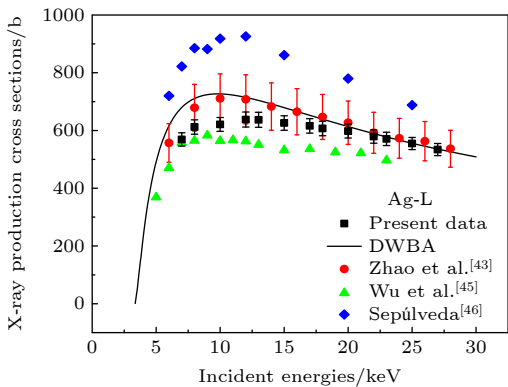


图9 能量为7—27 keV的电子碰撞Ag靶L壳层特征X射线产生截面. 实心形状为实验值; 实线为DWBA理论值

Fig. 9. The L shell characteristic X-ray production cross sections of Ag target by 7–27 keV electron impact. The solid shapes are the experimental values. The solid line is DWBA theoretical value.

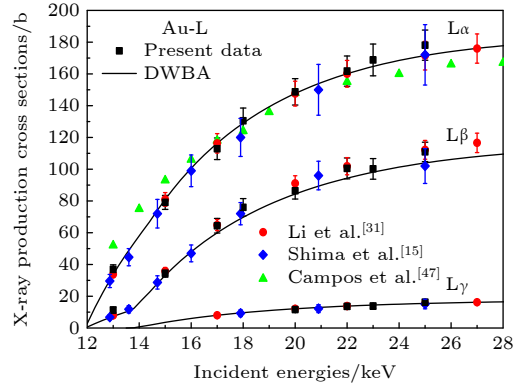


图10 能量为13—25 keV的电子碰撞Au靶L壳层特征X射线产生截面. 从上到下分别是L $\alpha$ , L $\beta$ 和L $\gamma$ 子壳层. 其中, 实心形状为实验值; 实线为DWBA理论值

Fig. 10. The L $\alpha$ , L $\beta$  and L $\gamma$  shell characteristic X-ray production cross sections of Au target by 13–25 keV electron impact (from top to bottom). The solid shapes are the experimental values. The solid line is DWBA theoretical value.

表4 Al, Ti, Cu的K壳层电离截面实验结果

Table 4. Experimental results of K shell ionization cross sections of Al, Ti and Cu.

Incident energies/keV	K-shell ionization cross sections and uncertainties/b			
	Al	Ti	Cu	
5	11720	±580		
7	12261	±616	689 ±41	
8	12378	±621	898 ±53	
10	12050	±588	993 ±55	151 ±8
12	10952	±546	1149 ±64	219 ±12
13	10526	±523	1191 ±67	264 ±15
15	9982	±488	1211 ±67	324 ±17
17	9258	±461	1236 ±69	377 ±20
18	9019	±449	1240 ±70	399 ±21
20	8495	±415	1256 ±70	426 ±22
22	7866	±390	1248 ±70	448 ±24
23	7629	±379	1243 ±69	453 ±24
25	7283	±355	1232 ±68	458 ±24
27	6923	±363		467 ±25

图5中入射电子能量达到8 keV以上时, Al的K壳层电离截面修正后的实验值(实心方形)与DWBA计算的理论值基本重合, 但5, 7 keV处的实验值低于理论值. 李颖涵等<sup>[31]</sup>使用纯Al厚靶测得的实验值(实心圆点)在形状上与DWBA理论值保持了很好的一致性, 但数值上整体高于理论值和本文的修正实验值. Mei等<sup>[39]</sup>使用薄靶厚碳衬底的方法测得的实验值(实心三角)在10 keV以下与理



表 5 Cu, Ag 和 Au 的 L 壳层特征 X 射线产生截面实验结果  
Table 5. Experimental results of L shell characteristic X-ray production cross sections of Cu, Ag and Au.

Incident energies/keV	L-shell X-ray production cross sections and uncertainties/b									
	Cu		Ag		Au-L $\alpha$		Au-L $\beta$		Au-L $\gamma$	
5	961	$\pm 49$								
7	883	$\pm 45$	569	$\pm 23$						
8	842	$\pm 43$	612	$\pm 25$						
10	770	$\pm 39$	621	$\pm 24$						
12	719	$\pm 37$	638	$\pm 26$						
13	704	$\pm 36$	637	$\pm 26$	36.9	$\pm 2.9$	11.3	$\pm 1.9$		
15	653	$\pm 33$	626	$\pm 25$	79.1	$\pm 4.4$	34.5	$\pm 2.5$		
17	601	$\pm 31$	616	$\pm 25$	112.9	$\pm 6.8$	64.4	$\pm 4.6$		
18	587	$\pm 30$	607	$\pm 25$	130.5	$\pm 8.0$	76.0	$\pm 5.5$		
20	558	$\pm 28$	598	$\pm 24$	148.7	$\pm 8.3$	86.4	$\pm 5.2$	11.6	$\pm 1.3$
22	520	$\pm 27$	579	$\pm 23$	161.8	$\pm 9.5$	100.5	$\pm 6.6$	13.6	$\pm 1.8$
23	505	$\pm 26$	571	$\pm 23$	168.8	$\pm 10.0$	100.2	$\pm 6.5$	13.8	$\pm 1.8$
25	474	$\pm 24$	555	$\pm 21$	178.1	$\pm 9.5$	110.9	$\pm 6.1$	16.3	$\pm 1.4$
27	452	$\pm 23$	534	$\pm 21$						

论值也有一定的偏差. 文献 [39] 同时展示了他们使用另一种单原子栅格碳衬底的薄靶测量的 Al 的 K 壳层电离截面值, 结果与理论值符合得差一些. Silvina 等 [40] 使用薄靶薄衬底的方法测量了 Al 和 Ti 的电离截面 (图 5 和图 6 中的实心菱形), 其对 Al 靶进行修正后的结果显示, 在入射电子能量略高于电离阈能的低能段, 实验值较接近 DWBA 理论值, 而入射能量继续升高时, 尤其是 5 keV 附近的电离截面峰值处, 实验值明显高于理论值, 图 6 中 Ti 的电离截面也有此趋势. 此外, Mei 等 [39] 使用薄靶厚碳衬底的方法测得的 Se ( $Z = 34$ ) 的 L 壳层产生截面也出现了与本文的实验值一样的情况 (即在较高的电子入射能量时 (5—30 keV) 实验值与理论值符合得很好, 而低能端 ( $< 5$  keV) 实验值低于理论值). Se 的 L 壳层特征峰中心能量 (1.4 keV) 与 Al 的 K 壳层 (1.5 keV) 接近. 对此, 他们给出的解释是, DWBA 理论适用于入射电子能量远大于靶原子内壳层电子电离阈能的情况, 在入射电子能量接近阈能时, 理论值会偏高. 但这种解释需要进一步讨论, 如 Merlet 等 [22] 使用薄靶薄碳衬底的方法对 Ga ( $Z = 31$ ), As ( $Z = 33$ ) 的 K 和 L 壳层产生截面测量结果表明, 入射电子能量略大于阈能时实验值与 DWBA 理论值基本一致, 而当入射能量继续升高时, 有些实验值明显整体高于 (Ga 和 As 的 K 壳层产生截面) 或低于 (Ga 和 As 的 L 壳层产生截面) DWBA 理论值. 对实验仪器进行对比发现,

Merlet 等 [22] 使用的 X 射线探测器是能量分辨能力更好的波长色散 (WD) 光谱仪, 而本次实验使用的是 SDD 硅漂移探测器, 并且为了防止散射电子进入探测器, 在探测器前加装了一对偏转磁铁. 观察图 5、图 8 和图 9 发现, 实验与理论偏差较大的点都在入射能量为 10 keV 以下处. 如果偏转磁铁存在漏磁, 入射电子束能量越低, 受到磁场的影响, 电子运动方向发生的改变就越大, 即对 (1) 式中夹角  $\theta$  的影响就越大, 从而导致实验结果的误差. 实验前在偏转磁铁的设计中加厚了磁铁侧面的磁轭, 并且磁场强度和均匀性检测报告表示漏磁可以忽略. 此外, 使用直径 1 mm 的 Ag 靶进行实验验证也未发现入射电子束发生偏移. 因此, 有关问题值得进一步研究.

对于图 6 中 Ti 的 K 壳层电离截面, 本文的实验值 (实心方形) 低于 DWBA 理论曲线、李颖涵等 [31] 的实验值 (实心圆点) 和 Silvina 等人 [40] 实验值 (实心菱形). 与 Al 相同, 李颖涵等 [31] 使用纯 Ti 厚靶测得的实验值在形状上与 DWBA 理论值保持了很好的一致性, 但数值上整体偏高. Silvina 等 [40] 测得的 Ti 电离截面在入射电子能量小于 10 keV 时与理论值符合较好, 大于 10 keV 时明显偏大. RBS 测得的 Ti 靶厚度比标称厚度小约 5%, 而在处理实验数据和模拟计算时, 本文统一使用的是标称厚度, 因此可能会导致 K 壳层电离截面的计算结果偏低. 总体来看, DWBA 理论曲线位于本文

的实验值与李颖涵等<sup>[31]</sup>和 Silvina 等<sup>[40]</sup>的实验值的中间, 本文的实验值与理论值相差约 10%.

图 7 中, 对于 Cu 的 K 壳层电离截面, 本文的实验值 (实心方点) 高于 DWBA 理论值与 He 等<sup>[41]</sup> (实心上三角)、周长庚等<sup>[42]</sup> (实心菱形) 和 Shima 等<sup>[15]</sup> (实心圆) 的实验值, 但在实验误差范围内还是符合的.

图 8 给出了 Cu 的 L 壳层特征 X 射线产生截面实验值与 DWBA 理论值的比较. 对入射电子能量在 5—27 keV 的 Cu 的 L 壳层特征 X 射线产生截面, 没有可对比的实验数据, 本文给出了实验数据. 与 Cu ( $Z = 29$ ) 序数相近的元素有 Ga ( $Z = 31$ ), Ge ( $Z = 32$ ) 和 As ( $Z = 33$ ), Merlet 等<sup>[22]</sup> 使用薄 GaAs 靶薄碳衬底的方法测量了 Ga 和 As 的 K 和 L 壳层产生截面, 测量结果显示, Ga 和 As 的  $L\alpha$  壳层产生截面实验值整体低于理论值 (约 10%—20%). 这种趋势与本文的实验结果是一致的. 图 8 中, 入射能量在 10 keV 以上的实验值与理论值相差约 4%—10%, 而 5—10 keV 的实验值与理论值相差约 13%—22%. 同时也应该注意到, 用于 DWBA 理论值计算的 (3) 式中涉及的荧光产额和 Coster-Kronig 跃迁概率等参数也存在较大的误差 (可达 30% 左右)<sup>[43,44]</sup>.

从图 9 可以看出, 本文测量的 Ag 的 L 壳层特征 X 射线产生截面的实验值 (实心方点) 在入射电子能量为 5—15 keV 时低于 DWBA 理论值 (实线); 能量在 20 keV 以上时, 实验值与理论值符合得很好. Zhao 等<sup>[43]</sup> 和 Wu 等<sup>[45]</sup> 均采用薄 Ag 靶 Al 厚衬底的方法, Zhao 等<sup>[43]</sup> 在处理数据时考虑了 Ag 靶对 Al 厚衬底的扩散, 测得的实验值 (实心圆点) 与理论值符合得很好; 而 Wu 等<sup>[45]</sup> 使用的探测器 Be 窗相对更厚, 对低能光子的吸收更严重, 他们的实验值 (实心上三角) 比理论值低约 20%. Sepúlveda 等<sup>[46]</sup> 使用薄 Ag 靶 C 厚衬底的方法测量的实验值 (实心菱形) 高于理论值约 30%. 除了探测器效率刻度误差外, Sepúlveda 等<sup>[46]</sup> 所采用的电子束点入射的方法受靶厚度不均匀性的影响更大. 本文使用的是区域扫描法, 有利于减弱靶厚度不均匀性对实验结果的影响. 在实验误差范围内, 本文的实验结果与 Zhao 等<sup>[43]</sup> 的结果相符合.

图 10 给出了 Au 的  $L\alpha$ ,  $L\beta$  和  $L\gamma$  子壳层特征 X 射线产生截面实验值与 DWBA 理论值的比较. 结果显示, Au 的  $L\alpha$ ,  $L\beta$  和  $L\gamma$  特征 X 射线产生截面实验值 (实心方点) 与 DWBA 理论值曲线符合

得很好. 李颖涵等<sup>[31]</sup> 使用纯 Au 厚靶测量的实验值 (实心圆点) 与 Shima 等<sup>[15]</sup> 使用薄 Au 靶 C 薄衬底测量的实验值 (实心菱形) 与理论值在形状和数值上也都比较符合. 而 Campos 和 Vasconcellos<sup>[47]</sup> 使用薄 Au 靶厚 C 衬底测量的  $L\alpha$  子壳层特征 X 射线产生截面实验值 (实心三角) 在入射电子能量小于 2 倍 (约 18 keV) 电离阈能时略高于理论值, 大于两倍电离阈能时略低于理论值.

特征 X 射线电离或产生截面实验值的不确定度主要来源于实验谱特征峰光子计数的统计误差 (对于 Al, Ti 和 Cu 的 K 壳层电离截面以及 Cu 和 Ag 的 L 壳层产生截面, 误差 < 0.9%; 对于 Au 的  $L\alpha$  和  $L\beta$  壳层, 误差 < 3.9%; 对于 Au 的  $L\gamma$  壳层, 误差 < 5.3%), 靶厚误差 (< 5.2%), 探测器效率误差 (约 1.6%) 和靶修正系数  $K$  的误差. 其中, 靶修正系数  $K$  的误差来自于模拟值  $\sigma_{MC}$  的误差, 即模拟谱特征峰光子计数的统计误差 (对于 Al, Ti 和 Cu 的 K 壳层以及 Cu 和 Ag 的 L 壳层, 误差 < 2.1%; 对于 Au 的  $L\alpha$  壳层, 误差 < 4.6%; 对于 Au 的  $L\beta$  和  $L\gamma$  壳层, 误差 < 9.9%). 根据误差传递准则, 总的不确定度有: Al 的 K 壳层约为 5.0%; Ti 的 K 壳层约为 5.6%; Cu 的 K 和 L 壳层分别约为 5.1% 和 5.3%; Ag 的 L 壳层约为 4.0%; Au 的  $L\alpha$ ,  $L\beta$  和  $L\gamma$  壳层分别约为 6.1%, 8.9% 和 11.0%. 对于 Al, Ti 和 Cu 的 K 壳层电离截面以及 Cu 和 Ag 的 L 壳层产生截面以及 Au 的  $L\alpha$  产生截面, 误差来源主要是靶厚误差; 对于 Au 的  $L\beta$  和  $L\gamma$  壳层产生截面, 误差来源主要是特征峰光子计数的统计误差. 本文大多数实验值在误差范围内与理论值或现有实验值符合良好. 与之前的工作相比, 本文使用的靶更薄, 对实验值的修正也更小 (即修正系数  $K$  更接近 1); 测量靶厚使用的加速器的束流品质更稳定可靠, 有利于靶厚的准确测量.

## 5 结 论

本文使用 5—27 keV 能量范围内的单能电子束轰击薄 C 衬底上的 Al, Ti, Cu, Ag 和 Au 5 种薄靶, 测量了 Al, Ti 和 Cu 的 K 壳层电离截面以及 Cu, Ag 和 Au 的 L 壳层特征 X 射线产生截面, 并且使用蒙特卡罗 PENELope 程序对实验结果进行了修正. 当入射电子能量较低时, 电子的能量损失和靶的厚度对修正的影响较大. 靶的厚度越薄, 修正就

越小. 因此, 希望未来进一步改进制靶技术, 使用更理想的薄靶来进行截面测量工作.

本文给出了 Cu 的 L 壳层特征 X 射线产生截面. 与 DWBA 理论值相比, 本文的大多数实验值在 7% 以内符合得很好. 实验结果与理论值符合得最好的是 Al 的 K 壳层电离截面, 入射能量在 10 keV 及以上的点, 偏差小于 2%; 与理论值偏差较大的是 Cu 的 L 壳层特征 X 射线产生截面, 偏差约 5%—22%. Cu(包括 Ga 和 As) 的 L 壳层特征 X 射线产生截面与 DWBA 理论值的比较表明, 对中重元素的 L 壳电离截面的理论计算以及相应的原子参数(如壳层荧光产额和 Coster-Kronig 跃迁概率等)需要更精确地确定.

从目前的结果来看, 采用薄靶薄衬底、薄靶厚衬底以及厚靶方法测得的电离截面或产生截面值在误差范围内是相当的.

## 参考文献

- [1] Powell C J 1976 *Rev. Mod. Phys.* **48** 33
- [2] Zhao J L, An Z, Zhu J J, Tan W J, Liu M T 2016 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **49** 065205
- [3] Born M 1926 *Z. Physik* **38** 803
- [4] Truhlar D O, Rice J K, Kuppermann A, Trajmar S 1970 *Phys. Rev. A* **1** 778
- [5] Shelton W N, Leherissey E S, Madison D H 1971 *Phys. Rev. A* **3** 242
- [6] Madison D H, Shelton W N 1973 *Phys. Rev. A* **7** 499
- [7] Rainer H 1990 *Phys. Lett. A* **144** 81
- [8] Bely O, Schmartz S B 1969 *Astron. Astrophys.* **1** 281
- [9] Sampson D H 1986 *Phys. Rev. A* **34** 986
- [10] Fontes C J 1993 *Phys. Rev. A* **47** 1009
- [11] Segui S, Dingfelder M, Salvat F 2003 *Phys. Rev. A* **67** 062710
- [12] Colgan J, Fontes C J, Zhang H L 2006 *Phys. Rev. A* **73** 062711
- [13] Bote D, Salvat F 2008 *Phys. Rev. A* **77** 042701
- [14] Llovet X, Powell C J, Salvat F, Jablonski A 2014 *J. Phys. Chem. Ref. Data* **43** 013102
- [15] Shima K, Nakagawa T, Umetani K, Mikumo T 1981 *Phys. Rev. A* **24** 72
- [16] Shima K, Okuda M, Suzuki E, Tsubota T, Mikumo T 1983 *J. Appl. Phys.* **54** 1202
- [17] Llovet X, Merlet C, Salvat F 2000 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **33** 3761
- [18] Bote D, Llovet X, Salvat F 2008 *J. Phys. D: Appl. Phys.* **41** 105304
- [19] Moy A, Merlet C, Llovet X, Dugne O 2013 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **46** 115202
- [20] Qian Z C, Wu Y, Chang C H, Yuan Y, Mei C S, Zhu J J, Moharram K 2017 *EPL* **118** 13001
- [21] Liang S, Wu Y, Zhao Z, Xia X G, Ke Z X, Pan M, Wang B Y, Zhang P 2021 *Radiat. Phys. Chem.* **180** 109321
- [22] Merlet C, Llovet X, Fernandez-Varea J M 2006 *Phys. Rev. A* **73** 062719
- [23] Merlet C, Llovet X, Salvat F 2004 *Phys. Rev. A* **69** 032708
- [24] An Z, Li T H, Wang L M, Xia X Y, Luo Z M 1996 *Phys. Rev. A* **54** 3067
- [25] Luo Z M, An Z, He F Q, Li T H, Long X G, Peng X F 1996 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **29** 4001
- [26] Zhao J L, An Z, Zhu J J, Tan W J, Liu M T 2017 *Radiat. Phys. Chem.* **134** 71
- [27] Zhao J L, Bai S, An Z, Zhu J J, Tan W J, Liu M T 2020 *Radiat. Phys. Chem.* **171** 108722
- [28] Zhu J J, An Z, Liu M T, Tian L X 2009 *Phys. Rev. A* **79** 052710
- [29] Zhao J L, Tian L X, Li X L, An Z, Zhu J J, Liu M T 2015 *Radiat. Phys. Chem.* **107** 47
- [30] Wu Y, Liang Y, Xu M X, Yuan Y, Chang C H, Qian Z C, Wang B Y, Kuang P, Zhang P 2018 *Phys. Rev. A* **97** 032702
- [31] Li Y H, An Z, Zhu J J, Li L 2020 *Acta Phys. Sin.* **69** 133401 (in Chinese) [李颖涵, 安竹, 朱敬军, 李玲 2020 物理学报 **69** 133401]
- [32] Li L, An Z, Zhu J J, Lin W P, Williams S 2021 *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B* **506** 15
- [33] Fan Q W, Xu G J, Du Y H, Zhang R 2008 *Atom. Energ. Sci. Technol.* **42** 925 (in Chinese) [樊启文, 许国基, 杜英辉, 张榕 2008 原子能科学技术 **42** 925]
- [34] Han J F, An Z, Zheng G Q, Bai F, Li Z H, Wang P, Liao X D, Liu M T, Chen S L, Song M J 2018 *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B* **418** 68
- [35] Liu B, Ding W, An Z, Zhu J J, Zhang Z, Li L, Lin W P 2021 *Fusion Eng. Des.* **172** 112751
- [36] Sabbatucci L, Scot V, Fernandez J E 2014 *Radiat. Phys. Chem.* **104** 372
- [37] Salvat F, Fernández-Varea J, Sempau J 2008 *PENELOPE-2008, A Code System for Monte Carlo Simulation of Electron and Photon Transport* (Issy-les-Moulineau: OECD/NEA Data Bank)
- [38] Perkins S T, Cullen D E, Chen M H, Hubbell J H, Rathkopf J, Scofield J 1991 *Report UCRL-50400* **30** Lawrence Livermore National Laboratory, Livermore, CA
- [39] Mei C S, Wu Y, Yuan Y, Chang C H, Qian Z C, Zhu J J, Moharram K 2016 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **49** 245204
- [40] Silvina P L, Vasconcellos M A Z, Ruth H, Jorge C T 2012 *Phys. Rev. A* **86** 042701
- [41] He F Q, Peng X F, Long X G, Luo Z M, An Z 1997 *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B* **129** 445
- [42] Zhou C G, Fu Y C, An Z, Luo Z M 2000 *High Power Laser and Particle Beams* **12** 601 (in Chinese) [周长庚, 付玉川, 安竹, 罗正明 2000 强激光与粒子束 **12** 601]
- [43] Zhao J L, An Z, Zhu J J, Tan W J, Liu M T 2016 *Radiat. Phys. Chem.* **122** 66
- [44] Campbell J L 2003 *At. Data Nucl. Data Tables* **85** 291
- [45] Wu Y, An Z, Liu M T, Duan Y M, Tang C H, Luo Z M 2004 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **37** 4527
- [46] Sepúlveda A, Bertol A P, Vasconcellos M A Z, Trincavelli J, Hinrichs R, Castellano G 2014 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **47** 215006
- [47] Campos C S, Vasconcellos M A Z 2002 *Phys. Rev. A* **66** 012719

# Measurements of K-shell ionization cross sections and L-shell X-ray production cross sections of Al, Ti, Cu, Ag, and Au thin films by low-energy electron impact\*

Li Bo   Li Ling   Zhu Jing-Jun   Lin Wei-Ping   An Zhu<sup>†</sup>

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

( Received 23 January 2022; revised manuscript received 11 May 2022 )

## Abstract

The K-shell ionization cross sections of Al, Ti, Cu and L-shell characteristic X-ray production cross sections of Cu, Ag and Au ( $L\alpha$ ,  $L\beta$  and  $L\gamma$  subshells for Au) by electron impact at incident energy of 5–27 keV are determined experimentally. Thin films of the studied elements, deposited on thin carbon substrates, are employed as targets in the experiments. The thickness of the thin carbon substrate is  $7 \mu\text{g}/\text{cm}^2$ , the targets are Al, Ti, Cu, Ag and Au and their thickness values are  $5.5 \mu\text{g}/\text{cm}^2$ ,  $28 \mu\text{g}/\text{cm}^2$ ,  $35.5 \mu\text{g}/\text{cm}^2$ ,  $44 \mu\text{g}/\text{cm}^2$  and  $44 \mu\text{g}/\text{cm}^2$ , respectively. The target thickness values are checked by using Rutherford Backscattering Spectrometry (RBS). The electron beam is provided by a scanning electron microscope (KYKY-2800B). The characteristic X-rays produced are recorded by a silicon drifted detector (XR-100SDD, Amptek), which has a C2 ultrathin window and can detect the low-energy X-rays down to boron  $K\alpha$  line (0.183 keV). The detector efficiency is calibrated by using the standard sources ( $^{55}\text{Fe}$ ,  $^{57}\text{Co}$ ,  $^{137}\text{Cs}$  and  $^{241}\text{Am}$ ) for X-ray energy larger than 3.3 keV while using the characteristic peak method (i.e. by measuring characteristic X-ray spectra produced by 20 keV electron impacting various thick solid targets) for X-ray energy less than 3.3 keV. The experimental results are corrected by the Monte Carlo code PENELOPE for the effects of target structure and Faraday cup. Meanwhile, the electron escape rates obtained from the Faraday cup and the signal pile-up effect are also considered. The results show that when the incident electron energy is low, the influences of electron energy loss and target thickness are significant. The thinner the target, the smaller the correction is. Experimental uncertainties for K-shell ionization cross sections of Al, Ti and Cu are about 5.0%, 5.6% and 5.1%, respectively; experimental uncertainties for L-shell X-ray production cross sections for Cu and Ag are about 5.3% and 4.0%, and for  $L\alpha$ ,  $L\beta$ , and  $L\gamma$  of Au are about 6.1%, 8.9% and 11.0%, respectively. The experimental L-shell characteristic X-ray production cross sections of Cu are given for the first time. Compared with the theoretical values of the semi-relativistic distorted-wave Born approximation (DWBA), most of the experimental values in this work are in good agreement within 7% deviation. The best agreement between the experimental results and the theoretical values is obtained for the K shell ionization cross section of Al, and the deviation is less than 1.7% for the data where the incident energy is above 10 keV. The least consistency with the theoretical values is the experimental L shell characteristic X-ray production cross sections of Cu, with a deviation being about 5–22%. The comparison of the experimental L shell characteristic X-ray production cross sections of Cu (including Ga and As elements) with those from the DWBA theory indicates that the theoretical calculations of L shell ionization cross sections of medium heavy elements and the corresponding atomic parameters (such as fluorescence yields and Coster-Kronig transition probabilities) need to be more accurately determined. According to the present results, the ionization cross sections or characteristic X-ray production cross sections measured by the thin target thin substrate, the thin target thick substrate and the thick target methods are equivalent to each other within the uncertainties.

**Keywords:** atomic inner-shell ionization, characteristic X-ray, cross section, Monte Carlo simulation

**PACS:** 34.80.Dp, 02.70.Uu

**DOI:** 10.7498/aps.71.20220162

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 12175158).

<sup>†</sup> Corresponding author. E-mail: [anzhu@scu.edu.cn](mailto:anzhu@scu.edu.cn)



采用薄靶方法测量低能电子致Al, Ti, Cu, Ag, Au元素K壳层电离截面与L壳层特征X射线产生截面

李博 李玲 朱敬军 林炜平 安竹

**Measurements of K-shell ionization cross sections and L-shell X-ray production cross sections of Al, Ti, Cu, Ag, and Au thin films by low-energy electron impact**

Li Bo Li Ling Zhu Jing-Jun Lin Wei-Ping An Zhu

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 71, 173402 (2022) DOI: 10.7498/aps.71.20220162

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.71.20220162>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

## 您可能感兴趣的其他文章

### Articles you may be interested in

keV能量电子致Al, Ti, Zr, W, Au元素厚靶特征X射线产额与截面的研究

Characteristic X-ray yields and cross sections of thick targets of Al, Ti, Zr, W and Au induced by keV-electron impact

物理学报. 2020, 69(13): 133401 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20200264>

8–9.5 keV正电子致Ti的K壳层电离截面的实验研究

Experimental study on Ti K shell ionization cross sections induced by 8–9.5 keV positrons

物理学报. 2018, 67(19): 192101 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20180666>

数百MeV/u高能区C<sup>6+</sup>离子激发W的L壳层 X射线

W L-shell X-ray emission induced by C<sup>6+</sup> ions with several hundred MeV/u

物理学报. 2022, 71(11): 113201 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20212322>

光子碰撞Au靶产生L系特征X射线角分布

Angular distribution of L characteristic X-ray emission from Au target impacted by photons

物理学报. 2020, 69(12): 123201 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20191977>

近Bohr速度I<sup>20+</sup>离子在不同靶面上的L壳层X射线辐射

L-shell X-rays from near Bohr-velocity I<sup>20+</sup> ions impacting on various targets

物理学报. 2021, 70(2): 023201 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20201236>

特征  $\gamma$  射线谱分析的蒙特卡罗模拟技术

Monte Carlo simulation technology based on characteristic  $\gamma$ -ray spectrum analysis

物理学报. 2020, 69(11): 112801 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20200279>