

解説

## 高輝度 X 線照射による初期エネルギー付与 のシミュレーション

渡部 力\*, 全 曉民\*\*†, 山岡 人志\*\*

\* 国際基督教大学教養学部 \*\* 理化学研究所大型放射光施設計画推進部

### Simulation on Initial Energy Deposition by High Brilliance Xrays

Tsutomu WATANABE\*, Xiao-Min TONG\*\*† and Hitoshi YAMAOKA\*\*

\* Department of Physics, International Christian University

\*\* SPring-8 Project Team, The Institute of Physical and Chemical Research (RIKEN)

Electronic and atomic processes under high brilliance Xrays are simulated in order to estimate the initial heat distributions deposited directly by radiation. In the case of Xray irradiation, all the process of heat deposition can be traced theoretically making use of atomic physics calculation and the accumulated data of atomic processes. Incident Xrays interact with material through the process of Compton scattering, Rayleigh scattering and photo-ionization, ejected high energy electrons slow down by the processes of inelastic scattering and change their directions by elastic and inelastic scatterings and slow electrons due to electron-impact ionization and inner-shell excitation processes are also considered. Some applications to other problems are also referred.

#### 1. はじめに

放射線と一般に言われるものは物質に吸収されて熱になることはよく知られている。吸収線量の測定にはカロリメーターを使ったりするだけでなく、原子力発電も結局のところこの熱を用いている。しかし一般の放射線では非経験的に原子素過程の積み重ねでこの熱エネルギーの物質中に付与される分布を求める事は至難の技である。しかし X 線や電子ビームを用いた場合は入射から熱エネルギーが物質中に付与されるまでの諸過程を調べる事は不可能ではない。とくに近年光と原子、電子と原子相互作用素過程の詳細な実験と計算が進み、またこれらの原子過程のデータも多く蓄積さ

れてきている。こうした状況から X 線や電子入射の場合には入射後の原子、電子素過程を追跡して行く事が出来るようになっている。

いわゆる第3世代と呼ばれる大型放射光施設のうちフランス、グルノーブルにある ESRF (European Synchrotron Radiation Facility) はすでに完成稼働を開始している。アメリカ、アルゴンヌの APS (Advanced Photon Source), 日本の播磨科学公園都市の SPring-8 (Super Photon Ring 8-GeV) などが目下世界で建設中である。これらの施設では今までの光源から得られる光子数の  $10^3-10^5$  倍以上の光 (X 線) が得られ、今までは到底測定できなかった時間的変化の速い現象を X 線を用いて測

\* 国際基督教大学 教養学部 〒181 東京都三鷹市大沢3丁目10番2号

TEL 0422-33-3249 FAX 0422-33-1449, e-mail tsutomu@icu.ac.jp

† 現在 中国北京市中国科学院物理研究所

定する事が可能となった。が一方では高輝度のX線によってX線の光学系のデバイスが損傷したり、熱のためにミラー、モノクロメータの結晶などが膨張して、光学的分解能を下げる事になる。このため「高熱負荷のX線光学」として研究されており、モノクロメータの第1結晶を水やガリウム液体金属で冷却するなどの対策を施している。われわれはX線の照射から熱にいたる過程を調べる事により、散乱されたX線の何%が物質中で熱になるのか、その物質中での空間分布はどのようなものであるのかを知る事が出来る<sup>1)</sup>。すなわち「高熱負荷のX線光学」で仮定として与えているX線照射による初期の付与される熱エネルギー空間分布を求めるものである。

始めに単色の高輝度のX線が入射したときに光学的に興味のある物質についての熱の付与の過程について考察する。前にも述べたようにこの場合の熱となるエネルギーの源はX線である。いま単色のX線が光学的な素子を作る物質に入射したとする。熱エネルギー付与の過程は次の2つに分けて考える事が出来る。すなわち(1)入射X線が試料とコンプトン散乱、光電効果、レイリー散乱の過程を通して相互作用する。(2)コンプトン散乱、光電効果で放出された電子、あるいは電子衝突によって電離された電子は物質中の原子(分子)と弾性、非弾性散乱(励起衝突、電離衝突)を繰り返してスローダウンして行く。コンプトン効果、光電効果では光子の損失のエネルギーは電離エネルギーと放出される電子の運動のエネルギーの和である。この高エネルギー電子は試料中の原子との弾性、非弾性衝突を行う。付与されたエネルギーのある部分は2次X線、2次電子として試料の外に持ち出される。これは熱として付与されず、物質の外へ逃げる部分である。ある臨界量(カット・オフ・エネルギー)以下のエネルギーになった電子はそのエネルギーをすべてある物質の局所的な熱にしてしまうと仮定する。我々の計算ではこの臨界の電子のエネルギーを1keVとした。

1keVの電子は平均自由行程は10ナノメートル以下である。

コンプトン散乱、光電効果、レイリー散乱、電子の弾性散乱、電子の非弾性散乱、電子の制動放射、内殻電離などの過程を計算する事が出来る。ある入射X線について考えると、付与された熱エネルギーの物質内空間分布の他、透過したX線のスペクトルや放出電子のエネルギー・スペクトル、角度分布などを計算する事もできる。第2節でこの計算の方法について述べ、第3節で具体的な応用例について述べる。終わりにこの方法の検討を論じまとめを行う。

## 2. 計算方法

図1にシミュレーション計算のフローチャートを示す。まず光子1個が入射試料の中を通過する。コンプトン散乱、光電離、レイリー散乱(X線を吸収し、同じエネルギーのX線を再放射する過程)或いは試料の外に逸散の何れかが起こる。これらの起こる頻度はそれぞれの過程の断面積に比例している。コンプトン散乱やレイリー散乱、或いは蛍光X線過程の結果放出される2次の光子(X線)は1次のX線入射の場合と同じ過程を繰り返す。今の場合我々はX線のエネルギーを500keV以下の場合に限る事にする。従って電子・陽電子対生成過程は考慮に入れなくて良い。

コンプトン散乱、光電離によってできた2次電子は弾性衝突、非弾性衝突を通して試料と相互作用する。勿論電子が試料の外にでて、相互作用しないこともある。制動放射のX線によって再びX線の過程が繰り返される。これ以外にも多重電離過程を考慮にいれなければならない。しかし後で述べるように制動放射過程と電子衝突による内殻電離過程は断面積が小さいためにこれらの寄与を無視することが出来る。どのイベントがどの頻度で起こるかはここでもやはり各過程の断面積に比例するとする。電子はそのエネルギーがカット・オフ・エネルギー以下になるまで計算し、エネルギー

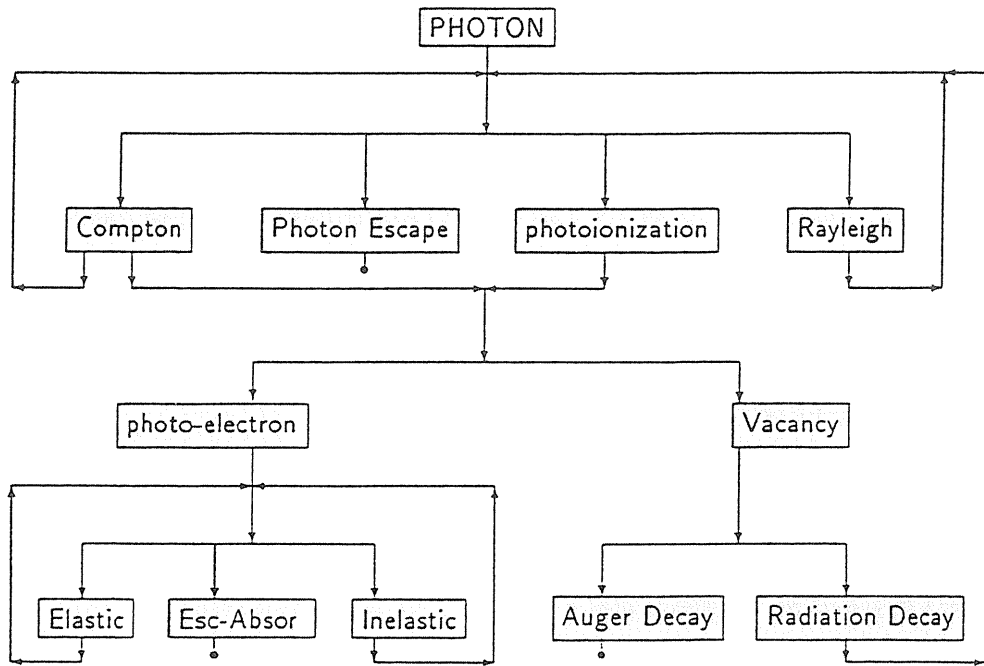


Fig.1 Chartflow of the simulation process. Esc-Absor means electron escapes from the material or is absorbed by the material because the electron energy becomes lower than the cut-off energy. The pair production and electron Bremsstrahlung processes are ignored because of low probability.

がそれ以下になるか、それとも電子が試料の外にでるかすると計算は終わる。

乱数を各分岐点でどの過程を選ぶかについて用いる。あるイベントが起こった時、その起こった空間の位置をメモリーに記憶する。ある物理現象の起こる位置の分布はこのメモリーを読みとる事によって得られる。光電離過程に関してはこの過程が多くの場合にX線入射の主な過程であるので特別の注意を払う必要がある。光子による内殻電離に続く過程として蛍光X線の放射は前にも述べたようにX線の過程を繰り返す事になる<sup>2,3)</sup>。オージェ過程の場合は放出される電子が多くの場合カット・オフ・エネルギー以下であるのでその原子のある位置の近傍の局所的な熱となると仮定する事が出来る。

## 2.1 コンプトン散乱断面積

コンプトン散乱は入射した光子が物質中の静止している自由電子と相互作用して、あたかも2粒

子の弾性散乱のようなメカニズムで光子は散乱し、電子は反跳される過程である。いまわれわれの問題とする原子に束縛されている電子に対するコンプトン散乱では(1)束縛状態の電子は自由電子よりも広い運動量分布を持っている、(2)束縛エネルギーはコンプトン散乱される光子エネルギーのシフトを与える点で異なっている。しかしこれらの効果は入射光子のエネルギーが大きいときは無視できる。入射光子のエネルギーが下がって来たときは問題となるが、今の我々の問題では光電離過程の断面積が圧倒的に大きくなるのでコンプトン散乱の断面積自身が問題でなくなる。例えばSiに対して50keV以下の入射X線ではコンプトン散乱断面積は光電離過程の断面積に比べて非常に小さい。ここでは自由電子に対するコンプトン効果のKlein-Nishinaの式<sup>4,5)</sup>

$$\frac{d\sigma_c}{d\omega'} = \pi r_0^2 \frac{mc^2}{\hbar\omega \cdot \omega'}$$

$$\left(1 + \frac{(\omega')^2}{\omega^2} - \frac{2(\gamma_0 + 1)}{\gamma_0^2} + \frac{1 + 2\gamma_0}{\gamma_0^2} \left(\frac{\omega'}{\omega}\right) + \frac{1}{\gamma_0^2} \frac{\omega}{\omega'}\right) \quad (1)$$

を採用する。ここで  $r_0 = e^2/mc^2$  (古典的電子半径),  $\gamma_0 = \hbar\omega/mc^2$ ,  $\hbar\omega$  と  $\hbar\omega'$  は入射光子と散乱光子のエネルギーである。光電子 (ここではコンプトン反跳電子も光電子と呼ぶことにする) のエネルギーは入射光子と散乱光子のエネルギーの差として与えられる。光子の散乱角度と電子の反跳角度は光子と電子の散乱前後のエネルギー保存則と運動量保存則から求めることができる。この解析的な式からコンプトン散乱後の光子と電子のエネルギー分布と散乱角分布, 反跳角分布から得られる。

## 2.2 光電離断面積

大部分の場合光電離過程は入射 X 線と標的物質の主要な相互作用である。従ってこの過程には特別な注意を払う必要がある。光電離断面積については多くの理論的な研究がされてきている<sup>6-8)</sup>。低い入射エネルギーの光子に対しては双極子近似で十分であるがここでは入射エネルギーは非常に広い領域をカバーしなければならないので, 多重極の寄与を考慮に入れることが必要である。

また重い原子に対する内殻電離過程では相対論効果を考慮にいれなければならない。デイラック・ハートリー・スレーター自己無撞着場の方法 (Dirac-Hartree-Slater self-consistent field method) を用いる<sup>9-12)</sup>。この方法は電子・電子間の交換積分項を重なり積分の 1/3 乗に係数 (通常 0.7) を掛けたもので表す方法であり, これに相対論効果を入れたものである。多重極遷移による光電離断面積は

$$\sigma_i^k = \frac{4\pi^2 e^2}{mc \cdot \omega} \cdot \frac{n_i}{2j+1} \sum_{\kappa} \sum_{\beta} \frac{1}{2\kappa+1} \cdot |\langle \psi_i | T_{\beta}^{\kappa} | \psi_i \rangle|^2, \quad (2)$$

で与えられる<sup>7, 8)</sup>。ここで  $n_i$  は  $i$  番目の殻の占有電

子数であり,  $\kappa$  は多重極の多重度数,  $\beta$  は電気多重極, 磁気多重極を区別する指数,  $j$  は始状態の角運動量,  $\langle \psi_i | T_{\beta}^{\kappa} | \psi_i \rangle$  は多重極行列要素であり,  $\psi_i$  と  $\psi_f$  は始状態, 終状態の波動関数である。電子の放出角度に関する微分断面積は単に標的波動関数の性質によって決まる。入射 X 線が直線偏光であるのか, 円偏光であるのかによってその依存性は異なる。一般に微分断面積は (2) 式の  $\sigma_i^k$  を用いて

$$\frac{d\sigma_i^k}{d\Omega} = \frac{\sigma_i^k}{4\pi} \cdot \left(1 + \sum_{m=0,2} \sum_{i=1}^{lmax} C_{i,m} \cdot P_i^m(\cos\theta) \cdot \cos(m\phi)\right)$$

によって与えられる。ここで  $C_{i,m}$  は光電子角度分布係数である。入射光が直線偏光か円偏光かによって値は決まる。

我々は 1keV から 500keV までの入射 X 線に対する光電離断面積の計算をシミュレーションの計算のデータベースの目的で行った。これらの結果は今までの他の計算および実験の値と良く一致する<sup>13, 14)</sup>。表 1 にその比較を示す。また図 2 に Si 原子に対する光電離断面積の入射 X 線のエネルギー依存性のデイラック・ハートリー・スレーター近似による計算値を示す。図 3 と図 4 に Si 原子に対する 40keV の X 線入射の場合の電子の放出角度微分断面積を示す。

## 2.3 レイリー散乱断面積

レイリー散乱は前にも述べたように原子が X 線を吸収し再び同じエネルギーの X 線を放出する過程である。X 線の放出する方向はランダムであり, 原子による光子の弾性散乱と考える事が出来る。この様にレイリー散乱は光励起, 光電離過程の 2 次摂動過程であるのでその断面積は一般に上記 1 次の過程に較べて小さい。従ってレイリー散乱は熱負荷の過程では重要ではないが, X 線のフィルターを通過時の指向性の分散を議論するときには問題となる事がある。ここでは寄与は小さい

Table 1 Cross sections (in barns) of the Compton processes, photo-ionization and the Rayleigh scattering processes for Si target.  $\sigma_T$ : total cross section of photon interaction processes,  $\sigma_I$ : cross section of photo-ionization,  $\sigma_C$ : cross section of the Compton scattering,  $\sigma_R$ : cross section of the Rayleigh scattering,  $\sigma_T = \sigma_I + \sigma_C + \sigma_R$ .

$h\nu(\text{keV})$	$\sigma_T$			$\sigma_I$		$\sigma_C$		$\sigma_R$	
	present <sup>a</sup>	experi. <sup>b</sup>	theor. <sup>c</sup>	present <sup>a</sup>	theor. <sup>c</sup>	present <sup>a</sup>	theor. <sup>d</sup>	present <sup>a</sup>	theor. <sup>d</sup>
24.53	110.00	109.42	110.63	101.45	101.47	8.55	6.83	7.88	2.33
30.12	61.85	61.43	62.38	53.45	53.46	8.39	7.02	5.67	1.90
35.06	41.41	41.18	41.90	33.16	33.17	8.24	7.12	4.39	1.61
40.05	29.89	29.71	30.32	21.78	21.78	8.11	7.17	3.49	1.37
45.18	22.85	22.71	23.22	14.86	14.86	7.98	7.19	2.82	1.17
50.01	18.62	18.28	18.95	10.75	10.75	7.87	7.18	2.26	1.02

<sup>a</sup> present calculation, <sup>b</sup> experimental data by J. F. Mika *et al.* [13], <sup>c</sup> theoretical calculation given in [6].

<sup>d</sup> Theoretical calculation [13] but for  $\sigma_R$  they do not exactly correspond to Rayleigh cross sections

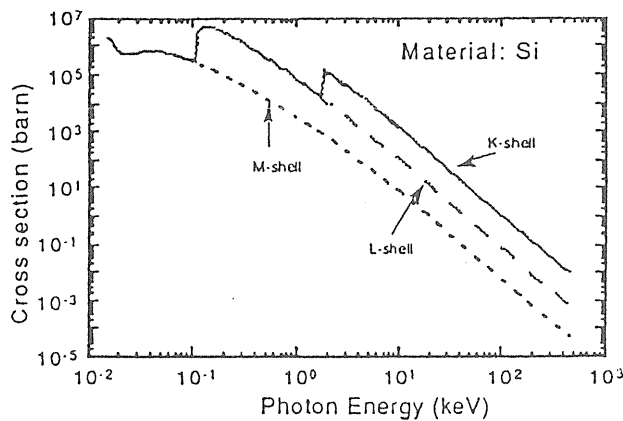


Fig.2 Photo-ionization cross section as a function of photon energy for Si atom, calculated using the Dirac-Hartree-Slater code.

ので簡単な構造因子近似を採用する。すなわち

$$\frac{d\sigma_R}{d\Omega} = \frac{r_0^2}{2} f^2(q) (1 + \cos^2\theta). \quad (3)$$

ここで

$$f(q) = \langle \psi_0 | \exp[iq \cdot r] | \psi_0 \rangle, \text{ with } |q| = q, \quad (4)$$

であり、 $\Psi_0$ は始状態の波動関数、 $q^2 = 2k^2(1 - \cos\theta)$ は運動量変化の2乗である。

表1にコンプトン散乱, 光電離過程, レイリー

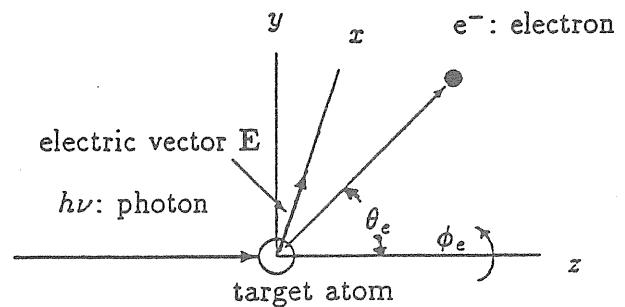


Fig.3 Schematic diagram of coordinate system of photo-ionization.

散乱の断面積およびそれらの和である全光吸収断面積の我々の計算値, 他の計算値, 実験値の比較を示す。

#### 2.4 電子衝突断面積

コンプトン散乱, 光電離過程で放出される電子(ここでは両方まとめて光電子と呼ぶことにする)は非弾性衝突, 弾性衝突, 制動放射過程を通して物質にエネルギーを与えて減速する。弾性衝突過程での光電子のエネルギー損失は殆どないが物質中にエネルギーが付与される空間分布に大きく影響を与える。高エネルギーの電子(500eV以上)の場合は衝突過程(非弾性, 弾性)の扱いは比較的簡単にボルン近似(1次摂動)で表す事が出来る。これ以下の低エネルギーでは孤立原子の標的に対

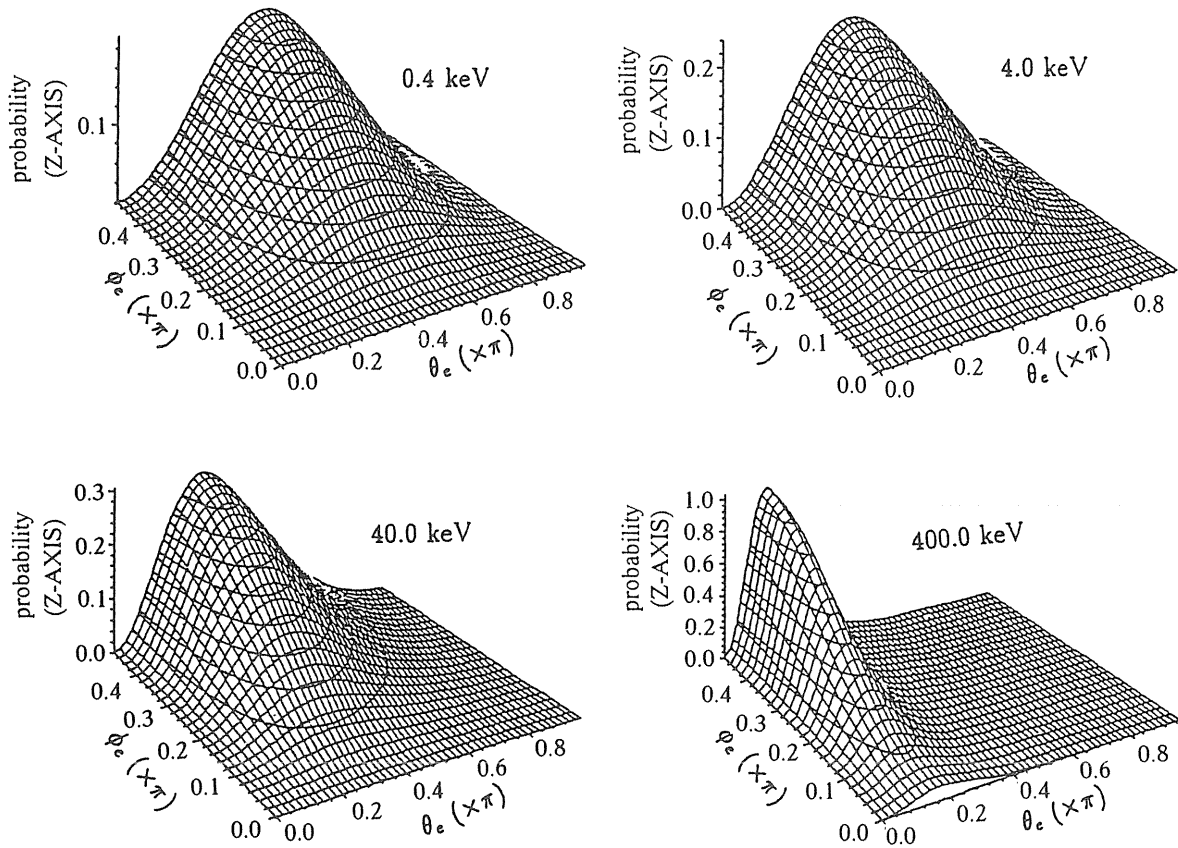


Fig.4 Angular dependence of photo-electrons ionized by Xrays in the case of 0.4, 4.0, 40, and 400 keV linearly polarized Xrays on Si atom;  $\theta_e$  (polar angle, x-axis in  $\times\pi$ ),  $\phi_e$  (azimuthal angle, y-axis in  $\times\pi$ ). Probability z-axis in arbitrary units.

しても扱いは簡単ではない。まして固体中での振る舞いは未だ完全には解明されていない。制動放射過程は専ら非常な高エネルギー電子の場合でしか問題にならない。以下順を追ってこれらの過程の扱いについて説明する。

式(4)で与えられた構造因子をもちいて、電子の弾性散乱断面積はボルン近似で

$$\frac{d\sigma_{el}}{dq^2} = \frac{4\pi m^2 e^4 Z^2}{\hbar^2 \kappa^2 q^4} (Z-f(q))^2, \quad (5)$$

のように与える。ここで  $2\hbar^2 q^2 = 2\hbar^2 k^2 (1 - \cos \theta_e)$  は電子移行運動量の2乗である。 $\hbar k$  は電子の運動量で  $\theta_e$  は散乱電子の散乱角である。 $q^2$  について0から  $4k^2$  まで積分する事により全弾性衝突断面積が得られる。

同様に、非弾性衝突の微分断面積がボルン

近似で、次のように書ける。すなわち

$$\frac{d\sigma_{in}}{dq^2} = \frac{4\pi m^2 e^4 Z}{\hbar^2 \kappa^2 q^4} \left( Z - \frac{f^2(q)}{Z} \right) \quad (6)$$

ここで  $q^2 = k^2 + k_f^2 - 2kk_f \cos \theta$ ,  $\hbar k$ ,  $\hbar k_f$  は電子の衝突前後の運動量である。衝突によるエネルギー損失  $W$  は  $W = \Delta E = \hbar^2 (k^2 - k_f^2) / 2$  であたえられる。全非弾性散乱断面積はこの式を  $q^2$  に関して  $(k-k_f)^2$  から  $(k+k_f)^2$  まで積分する事によって得られる。一般的に言えば一回の衝突でのエネルギー損失は僅かで  $\Delta E \ll \hbar^2 k^2$  から成立し積分上限は  $4k^2$  で下限は  $J^2 / 8E \hbar^2$  であたえられる。ここで  $J$  は第1電離エネルギーである。この式からはどれだけの運動量変化があるか、すなわち散乱角度依存がもとまる。しかし各衝突で電子のエネルギーがどれだけ損失するかについてはこれだけで

は一義的には決まらない。この式は各励起、電離過程の総和を取っているので1つ1つの過程に分けた式が必要である。これをボルン近似で求める事も可能であるが、ここではこれに古典2体近似(classical binary approximation, CBA)の式を用いる。すなわち入射粒子のエネルギーが与えられた場合のエネルギー損失確率 $P(W)$ はCBAによれば

$$P(W) = \begin{cases} kW^{-2}, & W_{\min} < W < E/2, \\ 0, & \text{その他} \end{cases} \quad (7)$$

である。ここで、エネルギー損失量の下限 $W_{\min}$ は平均エネルギー損失 $W_{av}$ を求める1種の規格化条件で求める。平均エネルギー損失 $W_{av}$ は電子の阻止能 $dE/ds$ で表せられるので

$$W_{av} = \int_{W_{\min}}^{E/2} WP(W) dW = -\frac{dE}{ds} \cdot \lambda_{in} \quad (8)$$

に合うように決める。ここで $\lambda_{in} = N\sigma_i$ 、 $N$ は原子密度である。電子阻止能 $dE/ds$ は低エネルギーの場合は経験式、高エネルギーの場合はボルン・ベテの式で与える。すなわち

$$\frac{dE}{ds} = -1.58884 \cdot \frac{2\pi e^4 Z \cdot N}{m v^2} \left(\frac{E}{I}\right)^{1/2}, \quad E < 6.338 \cdot I \quad (9)$$

$$\frac{dE}{ds} = -\frac{2\pi e^4 Z \cdot N}{mc^2 \beta^2} \left[ \ln \left( \frac{m \beta^2 \gamma^2 c^2 E}{I^2} \right) - \left[ \frac{2}{\gamma} + \beta^2 \right] \ln 2 + \frac{1}{\gamma^2} + 0.125 \left[ 1 - \frac{1}{\gamma} \right]^2 \right], \quad E \geq 6.338 \cdot I, \quad (10)$$

である。ここで $\beta = v_e/c$ 、 $\gamma = (1-\beta^2)^{-1/2}$ 、 $v_e$ は入射電子の速度、 $I$ は試料物質の平均励起エネルギーである。

## 2.5 高速電子の制動放射過程

光電子にはX線を放射して減速するという制動放射過程がある。電子の衝突による阻止能と制動放射過程による阻止能の比は

$$\frac{\left(\frac{dE}{ds}\right)_{rad}}{\left(\frac{dE}{ds}\right)_{coll}} \approx \frac{E \cdot Z}{1600 mc^2},$$

で与えられる。ここで $E$ は電子のエネルギー、 $Z$ は試料物質の原子番号である。我々の現在の関心のある電子エネルギー領域(1000keV以下)ではこの比は非常に小さく無視する事が出来る。

## 2.6 内殻励起の脱励起過程

入射X線の第1に起こる主な過程は光電離による内殻励起である。これらの内殻励起原子(イオン)では蛍光X線を出す放射減衰過程と2次電子を放出するオージェ過程(非放射減衰過程)が起こる。今我々が扱っている物質である低原子番号の物質ではオージェ過程が主である。電子のエネルギーが1keV(カットオフ・エネルギー)以下の場合には、そのエネルギーは全て局所熱になるという現在のモデルではその大部分は局所エネルギーに寄与する事になる。

## 3. X線、電子線の平均自由行程

X線、電子線と物質の相互作用の基本概念を得る量として、入射したこれらの粒子がそのエネルギー、方向を変えないで走る長さ、平均自由行程が定義されている。これは初めのイベントが起こるまでの距離であるからシミュレーションの計算を行う前に求める事が出来る。入射X線の平均自由行程 $\lambda_{ph}$ はコンプトン散乱、光電離、レイリー散乱過程による入射X線の減少として表される。すなわち $\hbar\omega$ をX線のエネルギーとして

$$\lambda_{ph}(\hbar\omega) = \frac{1}{\mu(\hbar\omega)} \quad \text{and}$$

$$\mu(\omega) = (\sigma_c + \sigma_i + \sigma_R) \cdot N, \quad (11)$$

として表される。おなじく電子線の平均自由行程はこれと同じ理由で入射電子線がフィルターを通った後の電子線のエネルギー・スペクトルも解析的に求めて行く事が出来る。

すなわち  $E$  を電子のエネルギーとして

$$\lambda_{el}(E) = \int_E^0 \left(\frac{dE}{dS}\right)^{-1} dE, \quad (12)$$

のように与えられる。

図5に Be と Si の標的の場合の X 線と電子線の平均自由行程を示す。X 線と電子では平均自由行程に  $10^2 - 10^3$  の大きさの差がある。

多極ウィグラー (MPW) からの X 線が各種のフィルターを通過した後のスペクトルの計算を行ったがこれらについては発表されている文献 15, 16 を参照されたい。

#### 4. X 線がプレートに垂直入射の場合

単色の X 線が板状の試料面に垂直に入射した場合に、始めの X 線の強度が位置によってどの様に変化するかもまたこの X 線が失ったエネルギーのう

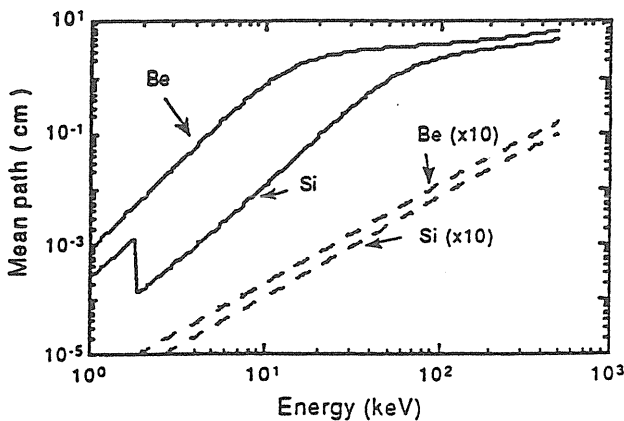


Fig.5 Photon mean free path lengths (solid line) and Electron mean free path (dashed line) for Si and Be.

ちどの程度試料中に熱の形で付与されるのかについてシミュレーションを行った。X 線が失ったエネルギーと試料中に付与されたエネルギーとの差は 2 次光子または 2 次電子の形で試料の外に逃げたものである。いくつかの計算の中で X 線光学として興味のある Be と Si のプレートに X 線が入射した場合の計算を掲げる。図 6-図 11 にそれぞれ Be に 10keV と 50keV の X 線が照射された場合、Si に 10keV, 30keV, 100keV, 400keV の X 線が照射された場合についての計算結果を示す。実線は入射 X 線の失ったエネルギーを示し点線は試料中に

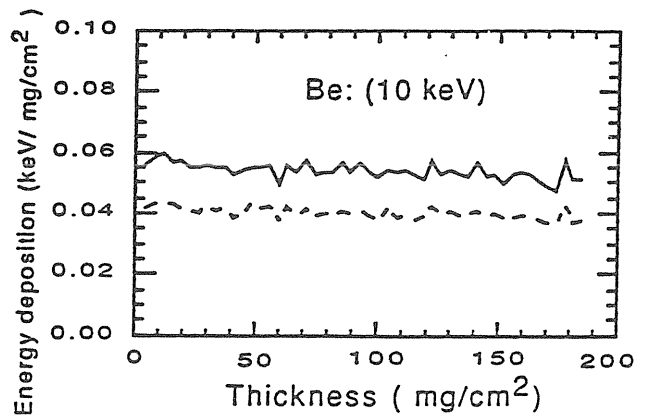


Fig.6 The initial lost energy from the incident photons and the final heat deposition in a 1 mm Be plate in the case of 10keV Xray irradiation with normal direction to the surface. Solid line: Photon energy deposition and Dashed line: Heat energy deposition.

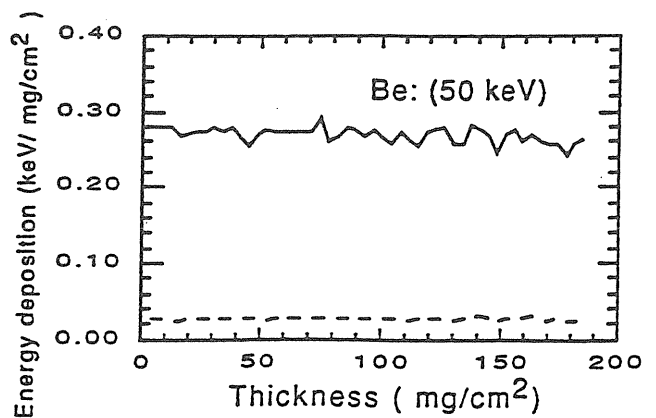


Fig.7 The initial lost energy (solid line) from the incident photons and the final heat deposition (dashed line) in the case of 50keV Xray irradiation on a 1 mm Be plate.



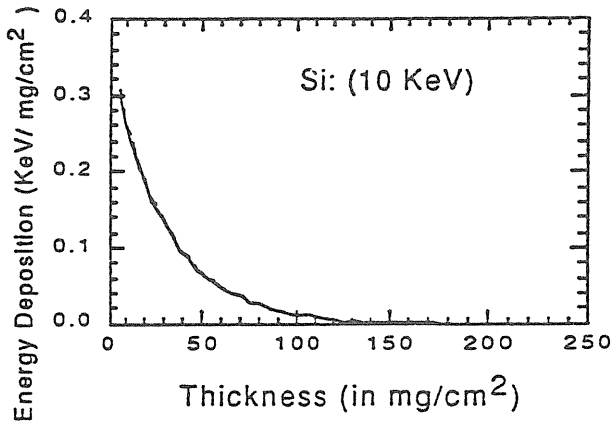


Fig.8 The initial lost energy (solid line) from the incident photons and the final heat deposition (dashed line) in the case of 10keV Xray irradiation on a 1 mm Si plate.

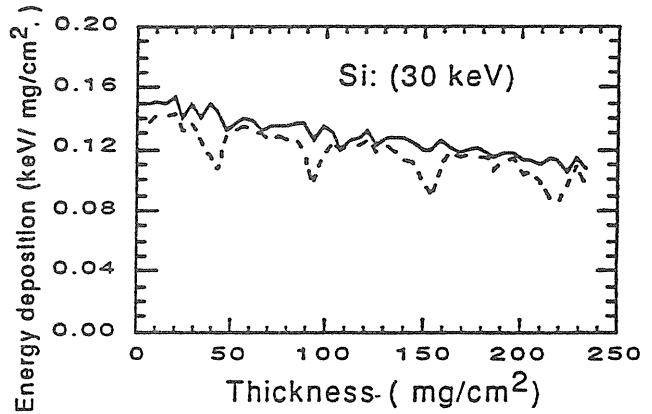


Fig.9 The initial lost energy (solid line) from the incident photons and the final heat deposition (dashed line) in the case of 30keV Xray irradiation on a 1 mm Si plate.

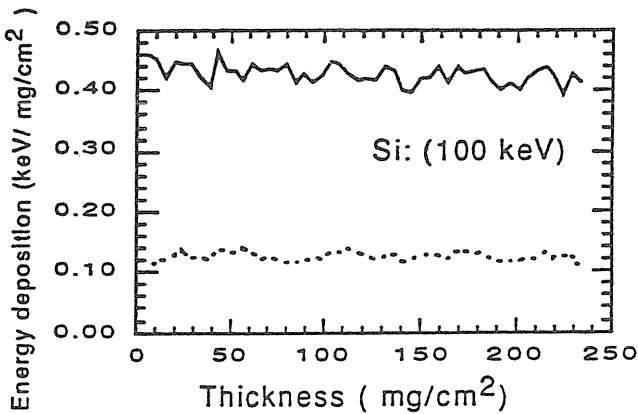


Fig.10 The initial lost energy (solid line) from the incident photons and the final heat deposition (dashed line) in the case of 100keV Xray irradiation on a 1 mm Si plate.

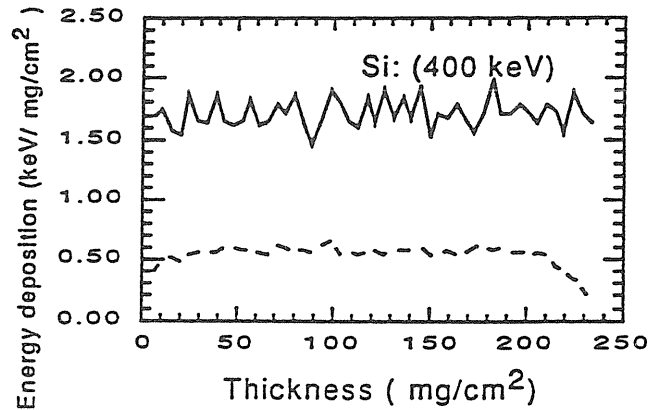


Fig.11 The initial lost energy (solid line) from the incident photons and the final heat deposition (dashed line) in the case of 400keV Xray irradiation on a 1 mm Si plate.

蓄えられた熱エネルギーを示す。Siのプレートに10keVのX線入射の場合にはその両者の差は殆どない。しかしBeのプレートでは50keVのX線入射の場合には10%程度しか熱エネルギーにならない。これは入射X線のエネルギーを失う原因が殆どコンプトン散乱によるのでこのために2次X線、2次電子の形で試料外にでてしまうためである。

この計算結果から、われわれは入射X線の単位軌道長さ当たりの失われたエネルギー ( $dE_s/dx$ ) に対する同じ単位軌道長さ当たりの最終的に試料に蓄えられる熱エネルギー ( $dE_o/dx$ ) の比に関する

経験式を得る事が出来る。まず始めに入射X線の単位軌道長さ ( $dx$ ) 当たりの失われたエネルギー ( $dE_o$ ) は次のように書き表す事が出来る

$$dE_o = [(\sigma_t + \sigma_c + \sigma_r) \hbar\omega] \cdot N dx \quad (13)$$

ここで  $\hbar\omega$  は初期入射X線のエネルギー、 $N$  は単位体積当たりの原子数である。X線の単位軌道長さ ( $dx$ ) 当たりの最終的に蓄えられる熱エネルギー ( $dE_s$ ) は

$$dE_s = \{ \sigma_I (I_{in} + \langle E_{p,e} \rangle (1 - e^{-x/\lambda_e}) f_1) + \sigma_C (\langle E_{C,e} \rangle (1 - e^{-x/\lambda_e}) f_2 + \langle E_{C,p} \rangle (1 - e^{-x/\lambda_p}) f_3) \} \cdot N dx \quad (14)$$

で与えられる。ここで、 $\langle E_{p,e} \rangle$ ,  $\langle E_{C,e} \rangle$ ,  $\langle E_{C,p} \rangle$ などはそれぞれ光電離電子の平均エネルギー、コンプトン散乱での反跳電子の平均エネルギー、コンプトン散乱での散乱X線の平均エネルギーである、また  $I_{in}$  は内殻のイオン化ポテンシャル、 $\lambda_e$  と  $\lambda_p$  は電子とX線の平均自由行程である。一般に  $\lambda_e \ll \lambda_p$  である。ここで  $\lambda_e \ll 0.1\text{mm}$  として  $\lambda_p \gg 1\text{mm}$  とし  $I_{in} + \langle E_{p,e} \rangle = \hbar\omega$ , 立体因子  $f_1, f_2, f_3 = 1$  とする。最終的にこの比は

$$\frac{dE_s}{dE_0} = \eta_0 = \frac{\sigma_I \cdot \hbar\omega + \sigma_C \cdot \langle E_{C,e} \rangle}{(\sigma_I + \sigma_C + \sigma_R) \cdot \hbar\omega} \quad (15)$$

であたえられる。

表2にX線が試料に垂直入射したときのプレート状の試料に蓄えられる熱エネルギーの%, プレートの前方に試料の外に逸散したエネルギーの%, おなじくプレート後方の試料の外に逸散したエネルギーの%, 前方方向に通過した電子のエネルギーの%を示す, また後方散乱した電子のエネルギーの%を示す。また試料中に蓄積される熱エネルギー式(15)によるの近似値をも示した。

## 5. X線がプレートに斜入射する場合

この場合エネルギーの付与という観点からだけ見ると, ブラッグ条件で反射される場合以外は垂直入射の場合と幾何学的条件が異なるとしてシミュレーションして行く事が出来る。またエネルギー付与の絶対量としてはブラッグ反射で割る割合は僅かである。いま Be, Siのプレートに垂直方法に対して  $\theta$  の角度で入射した場合入射X線がその物質と相互作用する事なく通過するパーセンテージ  $\eta_t$  は

$$\eta_t = \exp[-\mu(\hbar\omega) \cdot d / \cos\theta]. \quad (16)$$

によって与えられる。ここで  $\hbar\omega$ ,  $\mu(\hbar\omega)$ ,  $d$  はそれぞれ入射X線のエネルギー, 吸収係数, プレートの厚さである。X線の入射角による蓄積熱エネルギー分布, 試料外への2次X線の強度とスペクトル, 試料外へ放出の電子線の強度とスペクトルなどを計算する事が出来る<sup>14)</sup>。1例として40keVのX線をSiのプレートに斜入射させた場合の試料内に蓄積される熱の%, 相互作用せずに透過するX線のエネルギー%, プレートの裏側に透過する2次X線のエネルギー%, プレートの表側に反射される2次X線のエネルギー%を入射角度の関数として描き, さらにX線からの付与エネルギーの量を各入射角毎に表面からの深さの関数として描いたものを図12, 図13に示す。当然の事ながら入射角が大きくなるに従い(表面に小さい角度で入射するに従い)試料に蓄積される熱は増す。しかも表面に集中する。

## 6. まとめと検討

我々はX線と物質, 高速電子と物質の相互作用を求めるのに今までに蓄積されている原子過程の計算法とその計算コード, それに種々の原子過程データを用いてシミュレーションの計算を行い, X線が与える照射物質に付与された熱エネルギー分布を求めた。これは今までの「高熱負荷X線光学」での熱伝導の解析に於いて初期熱分布を与える計算である。

ここまでの計算では専ら単色のX線入射の場合のみを扱った。これは実際の応用計算にはいる前の基礎的な研究としての意味である。実際の計算ではベンディング磁石, 多極ウィグラー, アンジュレーターなどのX線のスペクトルが入射した場合について行う必要がある。我々は入射X線の吸収過程の計算をこうした場合について行いフィルターを通過した場合のスペクトルの変化を求めた<sup>15)</sup>。熱の試料内空間分布についても重畳原理を用いて計算する事が可能である。

計算コードの妥当性についてはだれしも気にな

Table 2 Energy partition of X-rays in the case of normal incidence to a plate specimen

Si plate							
$\hbar\omega$ (keV)	$d$ (mm)	$\eta_p(b)$ (%)	$\eta_p(t)$ (%)	$\eta_e(b)$ (%)	$\eta_e(t)$ (%)	$\eta$ (%)	$\eta_0$ (%)
10.0	1.00	0.07	0.00	0.05	0.00	99.9	99.9
30.0	1.00	3.87	5.10	0.06	0.06	91.0	87.3
50.0	1.00	14.66	19.50	0.09	0.18	65.6	61.2
100.0	1.00	26.50	44.90	0.08	0.23	28.3	26.3
400.0	1.00	15.00	52.80	1.88	0.19	30.1	31.2
50.0	0.01	16.50	22.20	8.56	20.60	32.2	61.2
Al plate							
$\hbar\omega$ (keV)	$d$ (mm)	$\eta_p(b)$ (%)	$\eta_p(t)$ (%)	$\eta_e(b)$ (%)	$\eta_e(t)$ (%)	$\eta$ (%)	$\eta_0$ (%)
10.0	1.00	0.12	0.00	0.06	0.00	99.8	99.3
30.0	1.00	5.03	6.27	0.05	0.07	88.6	84.3
50.0	1.00	16.96	23.20	0.07	0.14	59.6	55.3
100.0	1.00	27.80	47.00	0.04	0.15	25.0	23.7
400.0	1.00	15.10	52.75	1.65	0.08	30.4	31.2
50.0	0.01	18.50	25.40	7.02	17.36	31.0	55.3
C plate							
$\hbar\omega$ (keV)	$d$ (mm)	$\eta_p(b)$ (%)	$\eta_p(t)$ (%)	$\eta_e(b)$ (%)	$\eta_e(t)$ (%)	$\eta$ (%)	$\eta_0$ (%)
10.0	1.00	2.74	2.57	0.01	0.01	94.7	91.7
30.0	1.00	31.33	38.33	0.02	0.05	30.3	28.2
50.0	1.00	36.12	48.60	0.01	0.02	14.3	13.5
100.0	1.00	31.90	52.80	0.02	0.01	15.3	14.4
400.0	1.00	14.63	53.50	1.99	0.04	29.8	31.0
50.0	0.01	39.20	51.00	0.26	0.48	9.05	13.5
Be plate							
$\hbar\omega$ (keV)	$d$ (mm)	$\eta_p(b)$ (%)	$\eta_p(t)$ (%)	$\eta_e(b)$ (%)	$\eta_e(t)$ (%)	$\eta$ (%)	$\eta_0$ (%)
10.0	1.00	13.20	12.40	0.01	0.00	74.4	72.1
30.0	1.00	40.33	47.67	0.01	0.13	11.9	11.5
50.0	1.00	38.80	51.60	0.01	0.01	9.6	9.3
100.0	1.00	30.50	53.30	0.03	0.00	16.2	13.9
400.0	1.00	14.60	53.75	2.83	0.02	28.7	31.0
50.0	0.01	39.20	50.80	0.32	0.60	9.1	9.3

Note :  $\hbar\omega$  is the photon energy,  $d$  is thickness of specimen,  $\eta_p(b)$  and  $\eta_p(t)$  are the percentage of photon energy taken away by back-scattered photon and transmitted photon, respectively,  $\eta_e(b)$  and  $\eta_e(t)$  are the percentage of photon energy taken away by ejected electrons for backward and for forward, respectively and  $\eta$  and  $\eta_0$  are the percentage of photon energy stored in the specimen by simulation calculation and estimation by Equation (15).

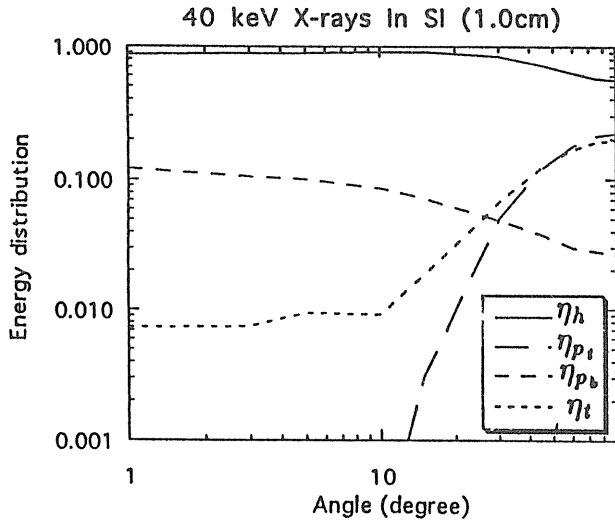


Fig.12 The energy distribution of Xrays in the case of Xray energy 40keV and thickness of specimen's plate 1.0cm and injection with grazing incidence. The energy percentages of purely transmitted Xrays ( $\eta_t$ ), forward remitted Xrays ( $\eta_i$ ), back-scattered Xrays ( $\eta_b$ ) and absorbed Xrays ( $\eta_a$ ).

るところで、一番良いのはこの計算に相当する実験を行う事である。可能ではあってもすぐには行かない場合現在ある他の分野の実験の値と比較する事であろう。妥当性で一番問題となるのは低エネルギー電子の扱いである。現在固体中低エネルギー電子の非弾性散乱については直接測定する手段がないからである。我々はこの計算コードを用いた実験との比較で次の2つの計算を行った。その第1は高速電子線入射による電離過程のイベント数の統計値およびその揺らぎの値の計算である。第2はX線による光電離電子スペクトルの非弾性散乱および弾性散乱効果である。

第1の実験はいわゆる放射線物理に於いてW値およびファノ因子と呼ばれる量の測定である。W値の定義は1電子・イオン対を生成するに要した放射線のエネルギーである。またファノ因子はW値の統計的な偏差の係数である。He, Ne, Ar, Kr, Xeなどの希ガスの気体および液体のに1keV-1MeVの電子線を照射したときの生成イオン対当たりの吸収エネルギーを測定する。シミュレーションの計算では低速電子の挙動は電離ポテンシャ

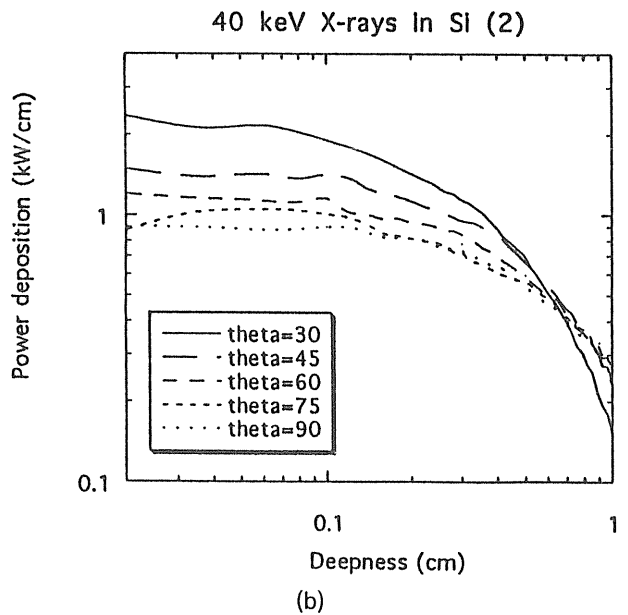
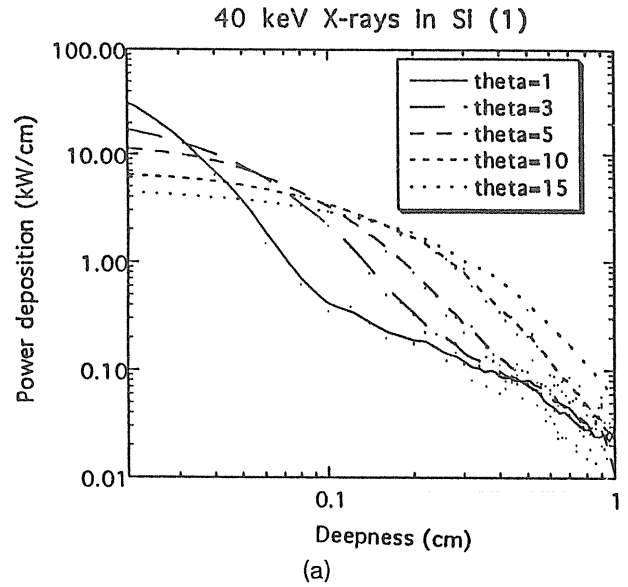


Fig.13 (a), (b) The deposition of Xray energy in the case of Xray energy 40keV and thickness of specimen's plate 1.0cm and injection with grazing incidence. The deposited energy of Xrays as a function of deepness in the specimen plate in the case of various incident angles. Power deposition coordinate is measured for 1 kW input power.

ルの値まで追跡する必要があるので現在の計算より厳密な扱いを必要としている。我々は気体系及び凝縮系について計算を行い実験値および他の計算値との比較に於いて満足できる結果を得た<sup>16)</sup>。

第2の実験はいわゆるXPS(X-ray Photo-electron Spectroscopy)またはESCA(Electron Spectroscopy

for Chemical Analysis) と呼ばれるスペクトル線の低エネルギー側の裾野の形およびその絶対値である。我々は Cu のプレートに Al の K- $\alpha$  線 (1.4keV) を照射してでる光電子の運動エネルギーの減速過程をシミュレーションした。結果は実験で得られるスペクトル・プロファイルを良く再現している<sup>17)</sup>。この場合も入射 X 線が 1.4keV と低いので我々の扱っていく条件としては非常に厳しい場合の扱いである。これらの比較によってこの計算コードは十分の信頼できる結果を与えていると結論出来る。

## 文献

- 1) X. M. Tong, T. Watanabe, H. Yamaoka and H. Nagasawa, Rev. Sci. Instr., **63**, 493 (1992).
- 2) X. M. Tong, H. Yamaoka, and Y. Sakurai, Proceedings of SPIE's 1992 International Symposium on Optical Applied Science and Engineering, X-ray optics, High heat flux engineering, 21 - 23 July, 1992; SPIE-Proceedings 1739, 562 - 574 (1992).
- 3) X. M. Tong, T. Watanabe and H. Yamaoka, J. Appl. Phys., (1995) to be published.
- 4) Klein and Y. Nishina, Z. Physik, **52**, 853 (1929).
- 5) Y. Nishina, Z. Physik, **52**, 869 (1929).
- 6) U. Fano and J. W. Cooper, Rev. Mod. Phys., **40**, 441 (1968).
- 7) P. H. Pratt, A. Ron and H. K. Tseng, Rev. Mod. Phys., **45**, 273 (1973).
- 8) Lei Liu, Xiao-Min Tong and Jia-Ming Li, Acta Physica Sinica, **37**, 1800 (1988).
- 9) D. A. Liberman, J. T. Waber and D. T. Cromer, Phys. Rev., **137**, A27 (1965).
- 10) D. A. Liberman, D. T. Cromer and J. T. Waber, Comput. Phys. Commun. **2**, 107 (1971).
- 11) Jia-Ming Li and Zhong-Xin Zhao, Acta Physica Sinica, **32**, 97 (1982).
- 12) Zhong-Xin Zhao and Jia-Ming Li, Acta Physica Sinica, **34**, 1469 (1985).
- 13) L. Gerward, J. Phys. B, **22**, 1963 (1989).
- 14) J. F. Mika, L. J. Martin and Z. Barnea, J. Phys. C, **18**, 5215 (1985).
- 15) X. M. Tong, S. Munekawa, and H. Yamaoka, Nucl. Inst. Methods, **B71**, 427 (1992).
- 16) T. Watanabe, N. Yamamoto and X. M. Tong, Nucl. Inst. Methods, **A327**, 31 (1993).
- 17) X. M. Tong and T. Watanabe, unpublished work.

## 一口メモ

### 山 吹

新緑が美しくなる頃、黄金色の美しい花を咲かせる山吹は日本中どこでも湿気が多く、水はけの良い斜面などに幅広く自生しています。バラ科ヤマブキ属の多年落葉木で一重咲きの外、八重咲き種があります。

太田道灌の故事「七重八重 花は咲けども山吹の 実のひとつだに なきぞ悲しき」は八重山吹で実が付きません。少年時代、太くて白い枝の髓をやまぶき鉄砲の玉として遊んだり、にわとこ（接骨木）の代用として顕微鏡用の植物切片を作るのに用いたりしたことを思い出します。

ふやすことは簡単でして、株分けをするだけです。庭の片すみに植えてみたらいかがでしょうか。

(K. Ohsima)

