

XYs

Hideyuki Tatsuno

September 2020

1 原理

1.1 Transmission / Absorption

ある物質の厚さ t (cm) の位置までフォトンが透過する割合を計算するには **mass attenuation coefficients** μ/ρ (cm²/g) を使って

$$\exp [-(\mu/\rho)\rho t]$$

とかける。ここで ρ は物質の密度 (g/cm³) である。密度で割っているのを明示するために分母に ρ を書いているが、単に μ とかく場合もあるので単位には注意が必要である。吸収の割合は 1 から透過の割合を引けばよいので

$$1 - \exp [-(\mu/\rho)\rho t]$$

とかける。xraylib では **total attenuation cross section** **CS_Total_CP** となっているが、単位的には μ/ρ の値を採用していて、両者には次の関係がある

$$\mu/\rho = \sigma_{\text{tot}}/uA$$

ここで u は atomic mass unit (1.660 540 2×10⁻²⁴ g), A は標的元素の相対質量である。 σ_{tot} の単位は cm²/atom になる。ちなみに CSb_Total_CP を使えば barn/atom (1 barn = 10⁻²⁴ cm²) という単位の断面積が得られる。

化合物の場合は i 番目の元素の mass fraction w_i を用いて

$$\mu/\rho = \sum_i w_i(\mu/\rho)_i$$

とかける。

1.2 PhotoElectric Effect

光電効果は物質内でフォトンが吸収される現象である。先程の σ_{tot} には光電効果の断面積 σ_{pe} が含まれていて、xraylib ではその光電効果の部分 $(\mu/\rho)_{\text{pe}}$ だけを CS_Photo_CP でとってることができる。厚さ t までに吸収される割合は

$$1 - \exp [-(\mu/\rho)_{\text{pe}}\rho t]$$

となる。

余談だが σ_{tot} には光電効果 σ_{pe} , Rayleigh 散乱 σ_{coh} (coherent), Compton 散乱 σ_{incoh} (incoherent) が含まれる。フォトンエネルギーが十分高い場合は、電子陽電子対生成 σ_{pair} (これはさらに原子核による電場と原子中の電子による電場の効果に分けられる) と光核反応 $\sigma_{\text{ph.n.}}$ の断面積も加わる。

1.3 X-ray Fluorescence

フォトンによる励起後に特性 X 線を放出し脱励起する現象を記述する。ここではある X 線の **fluorescence cross section** として xraylib の CS_FluorLine_Kissel を採用した。ある元素の $K_{\alpha 1}$ X 線の fluorescence cross section は次のように定義できる

$$Q_{K_{\alpha 1}} = \sigma_K \omega_K R_{K_{\alpha 1}}$$

ここで、 σ_K は光電効果で K-shell を励起する断面積 (cm²/g)、 ω_K は電子が K-shell へ遷移するときに X 線を出す割合 fluorescence yield, $R_{K_{\alpha 1}}$ は放出される X 線が $K_{\alpha 1}$ である割合 radiative rate である。つまりこの 3 つの物理量の一つにまとめたものとして使っている。

最近では xraylib に cascade を考慮した fluorescence cross section が導入されており、CS_FluorLine_Kissel_Cascade, CS_FluorLine_Kissel_Nonradiative_Cascade, CS_FluorLine_Kissel_Radiative_Cascade, CS_FluorLine_Kissel_no_Cascade を使うことができる。CS_FluorLine_Kissel は CS_FluorLine_Kissel_Cascade と同じものである。

フォトンビームによる標的の蛍光 X 線を見る場合は標的内での自己吸収も考慮しなければならない。フォトンビームの入射角度 α , 蛍光 X 線の取り出し角度 β (これらは GUI の **Beam** のタブで設定できる) としたとき、測定器に入る標的 i 番目元素の $K_{\alpha 1}$ X 線の fluorescence は次のようにかける

$$I_{i,K_{\alpha 1}} = I_0 \frac{\Omega}{4\pi} w_i Q_{i,K_{\alpha 1}}(E_0) \rho t \left(\frac{1 - \exp(-\chi \rho t)}{\chi \rho t} \right)$$

$$\chi = \frac{\sum_{k=1}^n w_k (\mu/\rho)_k(E_0)}{\sin \alpha} + \frac{\sum_{k=1}^n w_k (\mu/\rho)_k(E_{i,K_{\alpha 1}})}{\sin \beta}$$

ここで I_0 は入射フォトン強度, Ω は測定器の立体角, w_i は i 番目元素の mass fraction, $Q_{i,K_{\alpha 1}}(E)$ はエネルギー E のフォトンに対する i 番目元素の $K_{\alpha 1}$ X 線の fluorescence cross section, ρ は標的密度, t は標的の厚さ, $(\mu/\rho)_k(E)$ は k 番目元素のエネルギー E における mass attenuation coefficients で、 $\sum_{k=1}^n$ は標的化合物全体を表している。 E_0 は入射フォトンのエネルギー, $E_{i,K_{\alpha 1}}$ は i 番目元素 $K_{\alpha 1}$ X 線のエネルギーである。後ろの括弧内の表記だけではあまりにも不親切なので、できるだけ計算の詳細を以下に記しておく。

角度 α で標的に入射したフォトンが厚さ x まで通過する割合は

$$I_0 \exp \left[-\mu(E_0) \rho \frac{x}{\sin \alpha} \right]$$

となる。ただしここでは $\sum_{k=1}^n w_k(\mu/\rho)_k$ と記述していたのを単に μ に改めた。微小間隔 dx 内で i 番目の元素の X 線 $K_{\alpha 1}$ を放出する割合は

$$w_i Q_{i,K_{\alpha 1}}(E_0) \rho dx$$

である。ここで光電効果の吸収の割合をマクローリン展開して dx の 2 次以上の項は無視した。さらにこの X 線が角度 β で標的の厚さ x を通過し測定器に入る割合は

$$\frac{\Omega}{4\pi} \exp \left[-\mu(E_{i,K_{\alpha 1}}) \rho \frac{x}{\sin \beta} \right]$$

である。これら 3 つの寄与をかけ合わせて x を 0 から t まで積分すると

$$I_0 \frac{\Omega}{4\pi} w_i Q_{i,K_{\alpha 1}}(E_0) \rho \int_0^t dx \exp \left[-\rho x \left(\frac{\mu(E_0)}{\sin \alpha} + \frac{\mu(E_{i,K_{\alpha 1}})}{\sin \beta} \right) \right]$$

となる。積分だけ計算すると

$$t \left(\frac{1 - \exp(-\chi \rho t)}{\chi \rho t} \right)$$

となる。ただし意図的に分母分子に厚さ t をかけた。以上から目的の式を得ることができた。すぐわかるように ρt はキャンセルするのだが、次元の計算をわかりやすくするために残してある。

1.4 量子効率

ある実験の測定器の量子効率という場合は、光源から測定器までのすべての物質を透過して測定器の吸収体で吸収できる確率を意味する。ただし冷凍機や測定器内に設置された窓だけを考慮して、条件が変わりうる周りの空気などは考慮しない場合もある (検出器だけの量子効率)。

量子効率を計算するには、透過と吸収の割合をそのままかければよい。X 線のエネルギーが低い場合は吸収体での Compton 散乱を考慮する必要はないが、エネルギーが高くなってくると **Compton** 散乱の寄与を無視できなくなる。この xys では吸収体中の Compton 散乱の効果は入れていないので、CdTe や TES (Sn) などでガンマ線領域をみる場合は注意されたし。