

X 射线标识谱 实验报告

作者（保护隐私暂不显示）

摘要：本次实验通过系统仿真 X 射线标识谱的产生、传播与衰减，在实验上验证了莫塞莱定律，并提出了表征光电吸收强度的有效反应电荷这一创新物理量。实验包含三个部分：莫塞莱定律验证、铝板衰减行为研究及人体对放射性核素吸收剂量的模拟。在莫塞莱实验中，通过对多种金属靶材 $K\alpha$ 谱线的分析，不仅确认了原子序数 Z 与特征能量 E 的平方根间的线性关系，还通过引入屏蔽系数 σ （测得 $\sigma \approx 2.19 - 2.29$ ）对模型进行了修正，拟合优度极高 ($R^2 \approx 1$)。在衰减实验中，我们首次定义并计算了有效反应电荷 Y ，用以定量描述不同元素在特定 X 射线能量下光电吸收截面的等效贡献，其值随原子序数 Z 增大而升高 (Ti: 4.36, Ag: 10.93)，揭示了光电截面标度律 Z^4 的内在微观修正。人体吸收模拟则量化了不同放射性核素 (Cs-137, Pu-238, Am-241) 的剂量风险。本研究提出的有效反应电荷概念，为从微观层面理解和预测材料对 X 射线的衰减能力提供了新视角，在辐射防护、材料设计与无损检测等领域具有应用潜力。

关键词：X 射线谱；莫塞莱定律；有效反应电荷；衰减截面；人体吸收剂量

I. 引言

X 射线标识谱，源于原子内层电子的特征辐射，是揭示物质元素组成与电子结构的核心指纹。自莫塞莱于 1913 年确立标识谱频率与原子序数平方的线性关系（莫塞莱定律）以来，X 射线光谱学便成为材料分析、医学成像、天文观测及安全检查等领域的基石技术。在材料科学中，X 射线荧光光谱 (XRF) 与电子探针显微分析 (EPMA) 依赖于精确的标识谱线数据库进行无损成分鉴定。在辐射物理学中，理解 X 射线与物质的相互作用，特别是光电效应主导的衰减过程，对于开发高性能辐射屏蔽材料、优化医学影像剂量及评估空间辐射环境风险至关重要。然而，传统理论模型在描述复杂体系或特定能区的光电截面时，常依赖于半经验参数，缺乏一个直观的、与原子序数直接关联的微观物理量来表征元素的“吸收强度”。本研究旨在通过系统的计算机仿真实验，在验证

经典物理定律的基础上，探索并引入一个新的物理描述符，以更深入地揭示光电吸收的微观机制，并为相关应用提供定量化的预测工具。

II. 实验原理

1、莫塞莱实验

使用高能射线源轰击材料，则有机会把内层电子轰击到自由态，留下一个空位。此时其他更高能级的内层电子会往该空位跃迁，发出特征谱线。本实验中主要的特征谱线是2P轨道向1S轨道跃迁的K α 谱线，莫塞莱利用该谱线测定了原子的核电荷数。

莫塞莱认为，采取波尔模型，则主量子数 $n = 2$ 向 $n = 1$ 能级跃迁的特征谱线能量应当满足

$$\Delta E = \frac{1}{2} Z^2 \alpha^2 \left(\frac{1}{1^2} - \frac{1}{2^2} \right)$$

即 $Z \propto E^{1/2}$ ，是即莫塞莱定律。实际上，由于内层电子具有屏蔽效应，公式应修正为 $Z - \sigma \propto E^{1/2}$ ；按照莫塞莱的理论通常取 $\sigma = 1$ 。对于金属材料， $Z \sim$ 几十，因此原始版本的莫塞莱定律仍然可以使用；而屏蔽系数 σ 也能够被实验测得。本实验测得的 σ 实际值在2左右。

2、衰减实验

实验中，用多层面密度 5.3 mg/cm^2 的铝板吸收X射线，可以期待测得吸收率并依此计算反应截面。

理论推导（详见V.2部分）证明，对于超越K吸收边的X射线，只有1s轨道的贡献是主要项。因此原子吸收截面可以视为单电子吸收截面的常数倍而不与核电荷数相关；若定义X射线在介质中的衰减规律是相对强度 $I \propto e^{-kx}$ ，则该衰减系数 k 满足关系

$$k = \frac{\rho}{M} Y \sigma$$

其中 ρ 是材料体密度， M 是材料原子的质量； σ 是单电子反应截面， Y 是有效反应电荷数，可以期待 Y 应当稍高于2左右。

结合 $M \sim Z$, $\sigma \sim Z^5 \lambda^3$ (理论推导见V.2部分, 此处采取经验规律 λ^3 而非理论推导的规律 $\lambda^{3.5}$) , 则可以得到经验规律 $k \propto Z^4 \lambda^3$ 。

3、人体对放射性射线的吸收

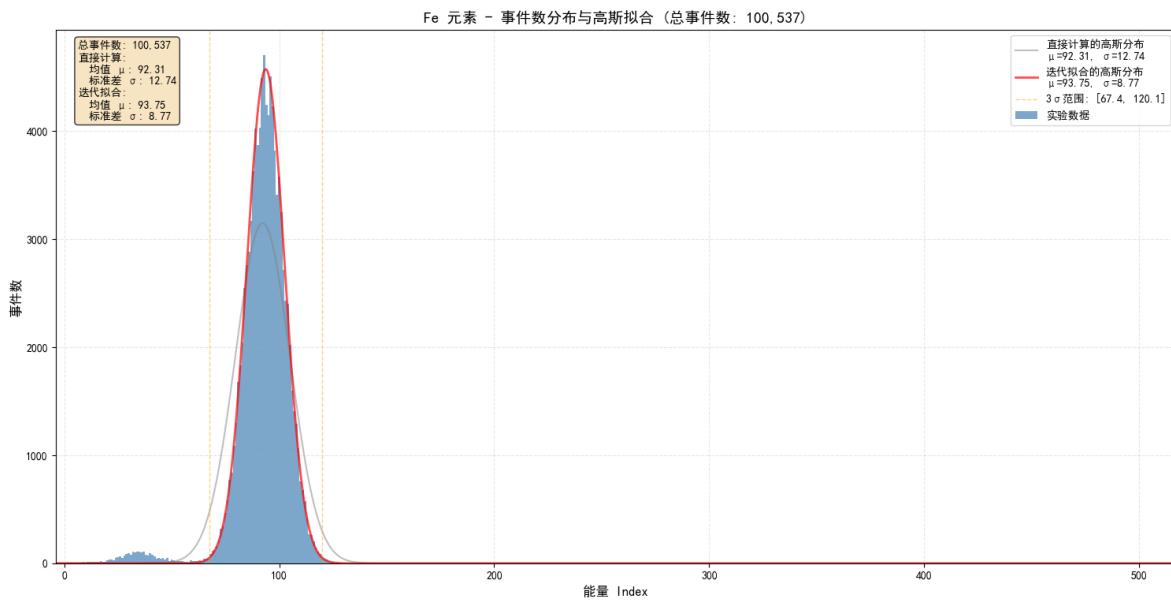
使用专业模拟软件, 模拟人体各器官对核素放在人体右侧一米处的吸收剂量; 本报告仅做数据分析。

III. 实验内容

实验通过计算机模拟生成实验数据。

1、莫塞莱实验

实验中使用高能电子束轰击金属靶产生 $K\alpha$ 特征谱线, 并被不同能量的电子接收器计数, 产生峰信号, 并经过处理得到峰值峰宽等信息。认为信道道数正比于能量。



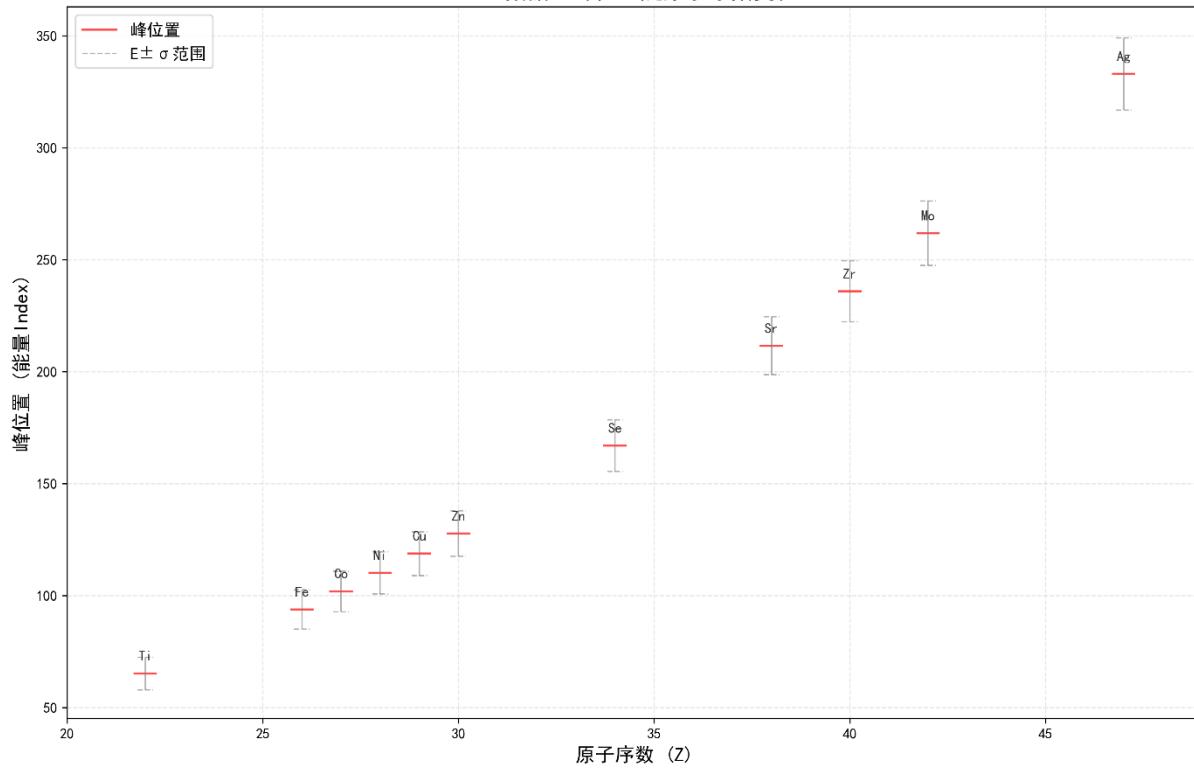
图III.1.1. 信号处理例

根据莫塞莱经验定律

$$Z - \sigma \propto E^{\frac{1}{2}}$$

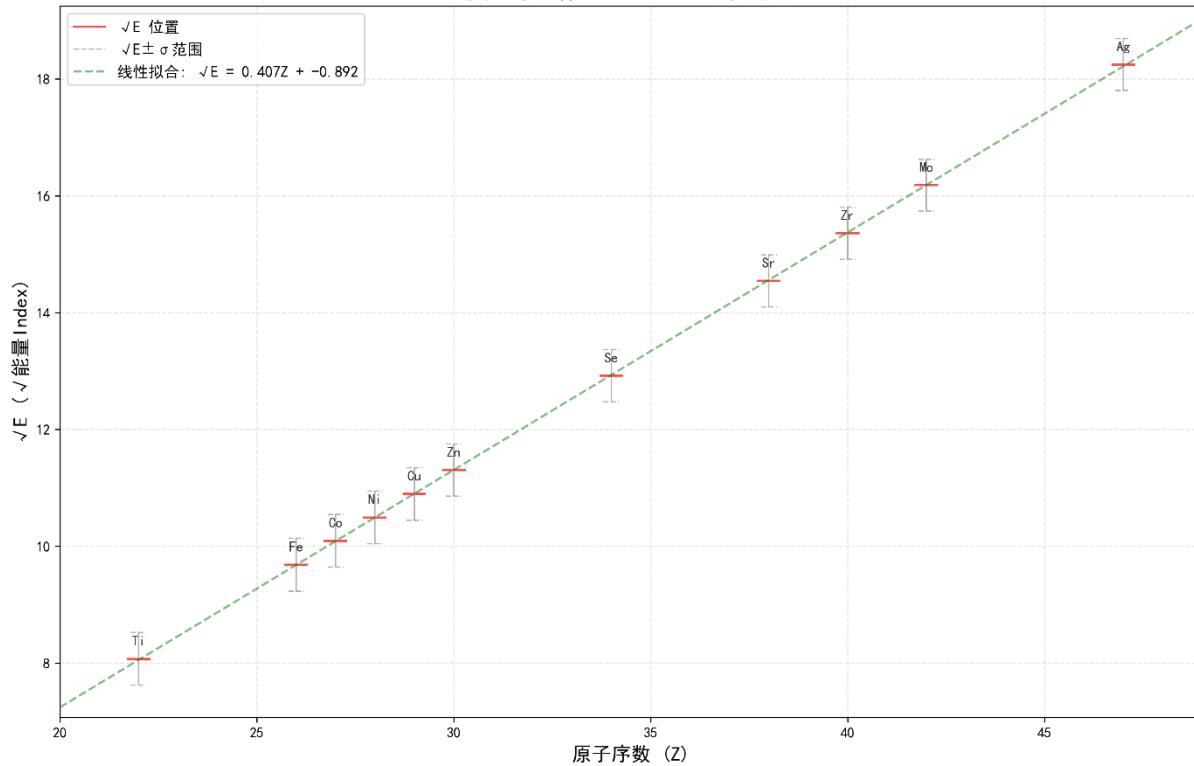
观察其线性规律可以验证该定律, 并求解得到屏蔽系数 σ 。

MSL数据：峰位置随原子序数变化



图III.1.2. 谱线与原子序数关系图

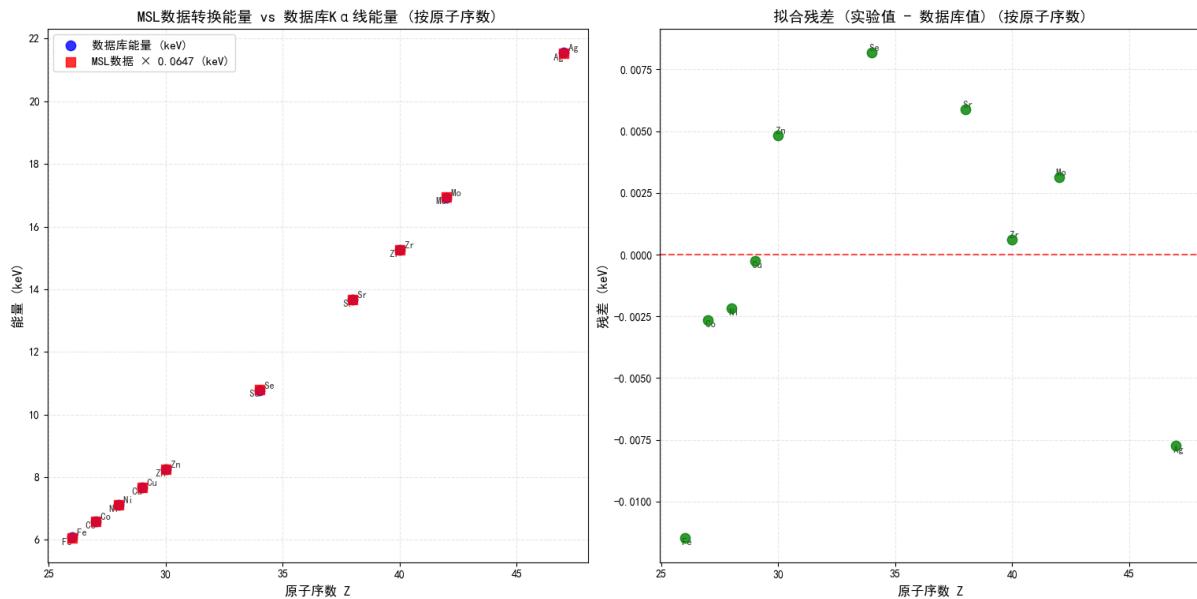
莫塞莱定律： \sqrt{E} vs Z 线性拟合



图III.1.3. 莫塞莱定律的验证

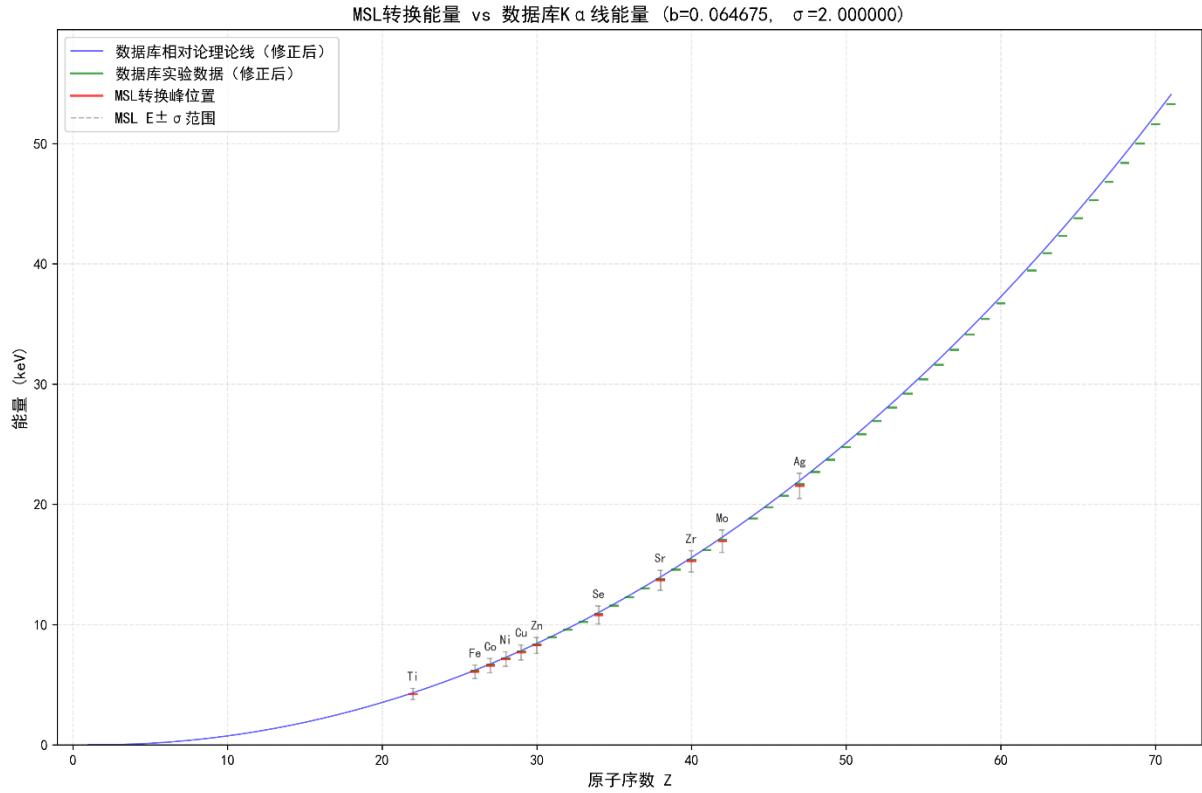
根据莫塞莱定律，拟合得屏蔽系数 $\sigma = 2.1944$ ；拟合优度 $R^2 = 1 - 1.9 \times 10^{-5}$ ，验证了莫塞莱定律。

同时，本实验数据可以和理论预言或查阅到的资料对照；由于本实验中 $\sigma \approx 2$ 而理论预言和数据资料均支持采取 $\sigma \approx 1$ ，因此对应的时候需要额外乘以修正因子来相对地调整屏蔽系数。经过拟合可以确定道数和实际能量的对应关系，以及得到修正过的屏蔽系数 σ 。



图III.1.4. 通过对比实验数据和资料，确定道系数和屏蔽系数

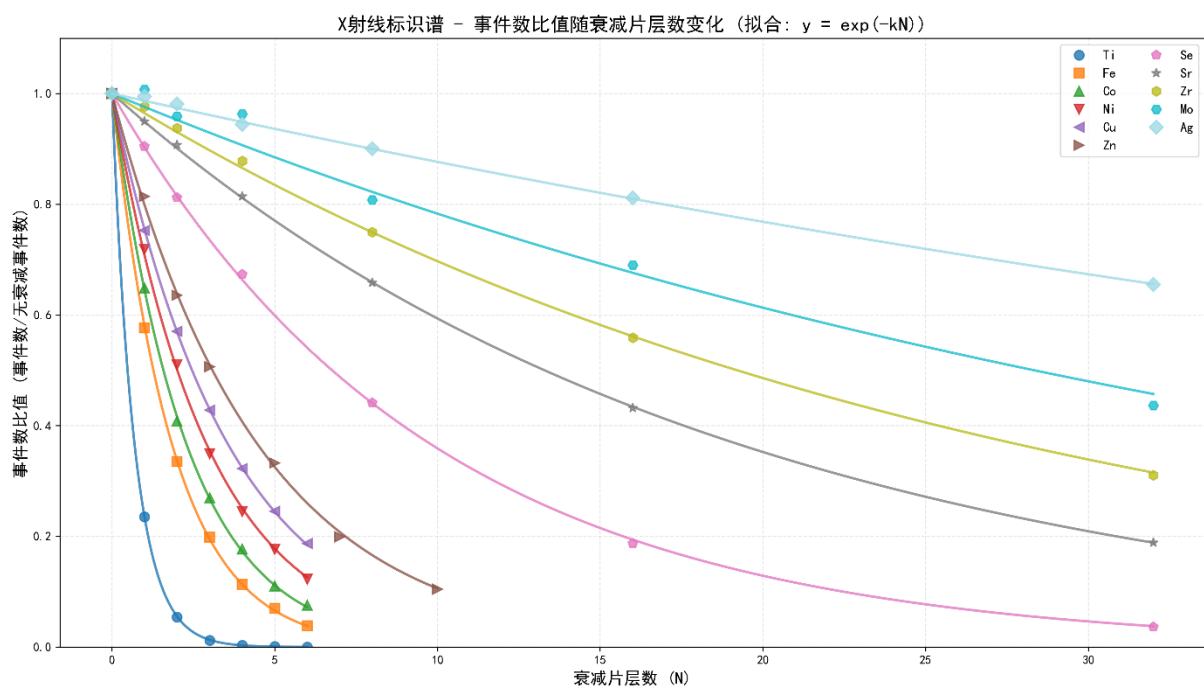
根据本次实验数据与资料的对比，拟合得到道系数 $\Delta E/\Delta n = 64.7\text{eV}/\text{道}$ ，屏蔽系数 $\sigma = 2.2858$ ，平均相对偏差0.0499%，效果极好。使用该道系数还原的能量也能够非常好地吻合理论预言。



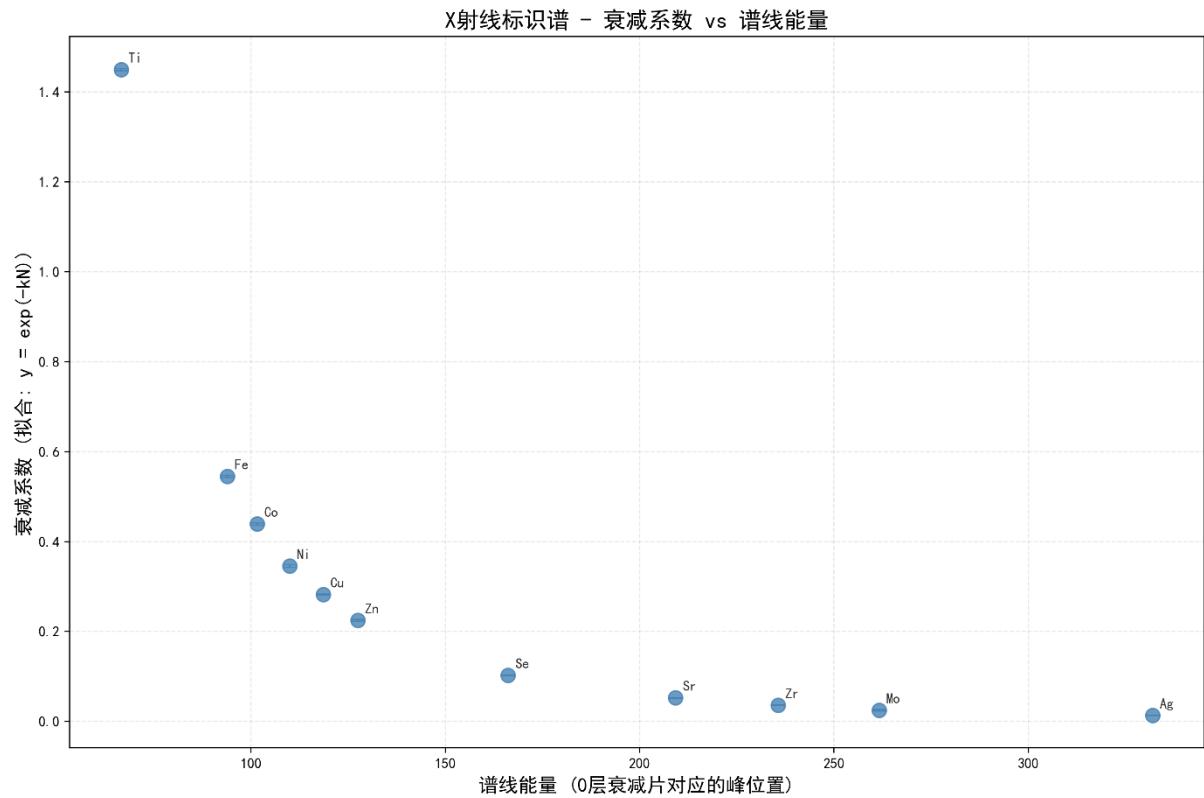
图III.1.5. 实验数据与相对论理论预言对比图

2、衰减实验

实验中，用多层面密度 $5.3\text{mg}/\text{cm}^2$ 的铝板吸收X射线，可以期待测得吸收率并依此计算反应截面。使用面密度计算的铝板厚度 $d = 19.6\mu\text{m}$ 。此后用到的统计量均采取层数 N ，衰减系数的定义也改为 $k_N = kd$ ， $I \propto e^{-k_N N}$ 。

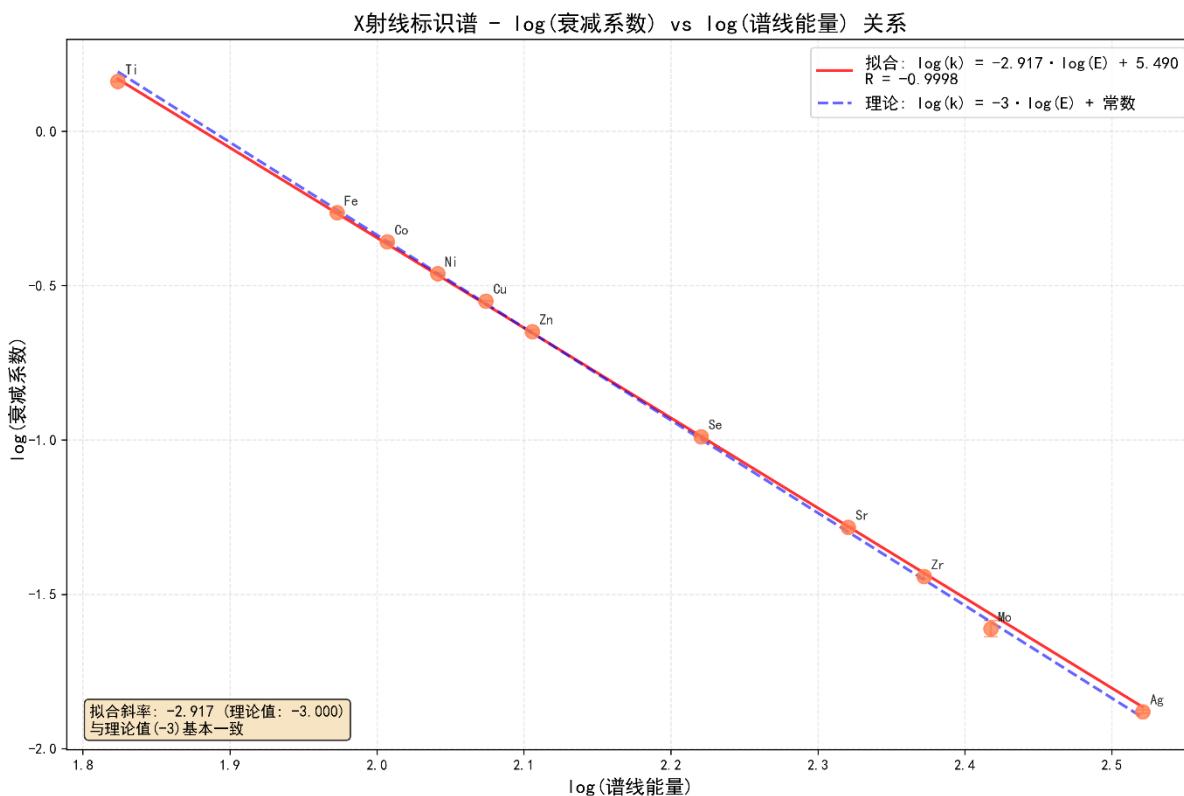


图III.2.1. 不同靶材特征谱线在铝板中的衰减



图III.2.2. 不同靶材特征谱线在铝板中的衰减系数

同一吸收材料对不同能量X射线衰减系数的经验公式为 $k \propto \lambda^3$ ，根据拟合可以验证这一规律，最后得到标度指数 $m = 2.917$ 。



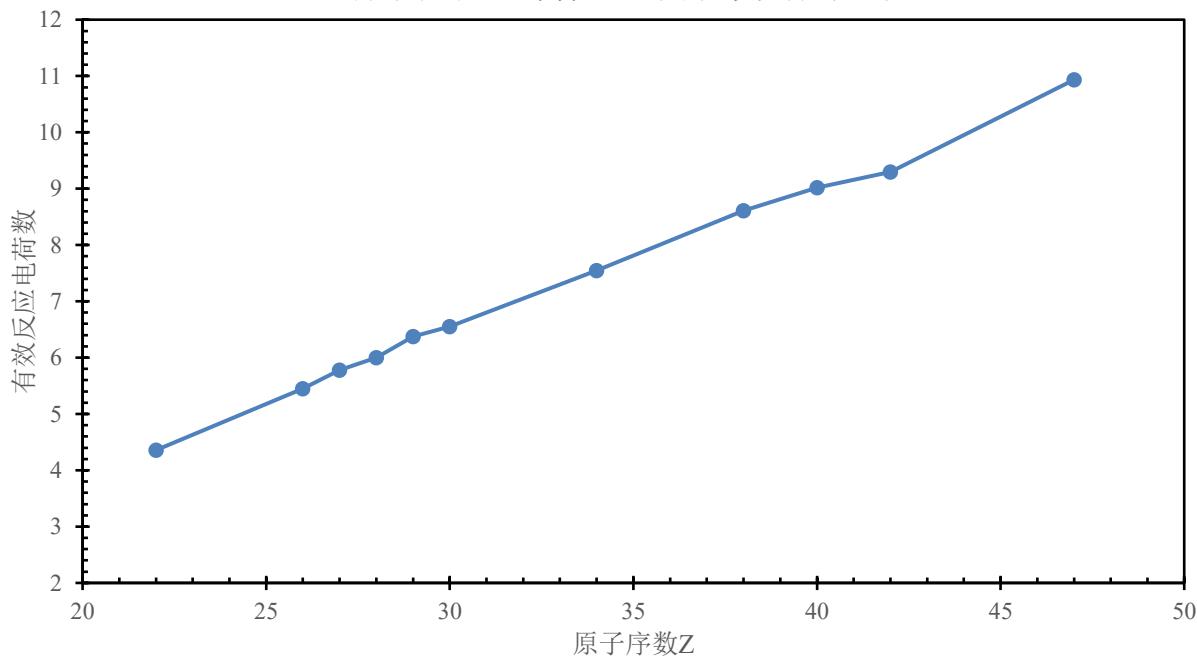
图III.2.3. 经验标度率的确定

根据实验数据可以计算得到（此处“实验散射截面”计算的是 $Y\sigma$ ）

| 元素 | 衰减系数/ μm^{-1} | 实验散射截面/ 10^{-20}m^2 | 理论截面/ 10^{-20}m^2 | 有效反应电荷 |
|----|--------------------------|------------------------------|----------------------------|----------|
| 钛 | 0.073921 | 6.257894396 | 1.436045 | 4.357727 |
| 铁 | 0.02778 | 2.351707159 | 0.431602 | 5.448792 |
| 钴 | 0.022375 | 1.894158298 | 0.327779 | 5.778763 |
| 镍 | 0.017624 | 1.492015981 | 0.248651 | 6.000454 |
| 铜 | 0.014375 | 1.21691394 | 0.190793 | 6.378188 |
| 锌 | 0.011457 | 0.969899579 | 0.148032 | 6.551945 |
| 硒 | 0.005228 | 0.442617428 | 0.05864 | 7.548008 |
| 锶 | 0.002661 | 0.22526725 | 0.026171 | 8.607365 |
| 锆 | 0.001841 | 0.155844941 | 0.01728 | 9.019016 |
| 钼 | 0.001248 | 0.105647338 | 0.011362 | 9.297910 |
| 银 | 0.000672 | 0.056909621 | 0.005205 | 10.93353 |

表III.2.2. 铝板对不同特征谱线的散射截面

有效反应电荷随原子序数变化关系



图III.2.4. 有效反应电荷数随原子序数变化关系

理论截面的计算没有考虑K边效应，同时仅计算单个K电子的截面，因此可能有不少误差，但数量级基本正确。同时可以看出电子总数越多有效反应电荷越多，是符合直觉的。

3、人体对放射性射线的吸收

多放射源剂量计算结果

数据文件目录: D:\课程作业\2025秋\近物实验\X射线标识谱\数据\数据处理\\$\Dose\..\..\Dose\ICRP145_HumanPhantomsAir\bin
计算时间: 2025-12-06 18:48:16

各放射源详细结果:

放射源: Cs-137 (Cs137.out)

事件数 (N): 1,000,000

器官数量: 187

总质量: 72.985700 kg

总吸收能量: 3.374063e-10 J

加权平均剂量: 4.622909e-18 Gy/source

加权平均剂量: 0.000005 pGy/source

1居里活度下的剂量率: 1.710e-07 Gy/s

达到25毫希沃特所需时间:

1.462e+05 秒

2.436e+03 分钟

4.060e+01 小时

1.692e+00 天

4.631e-03 年

放射源: Pu-238 (Pu238.out)

事件数 (N): 100,000

器官数量: 187

总质量: 72.985700 kg

总吸收能量: 5.567249e-10 J

加权平均剂量: 7.627863e-17 Gy/source

加权平均剂量: 0.000076 pGy/source

1居里活度下的剂量率: 2.822e-06 Gy/s

达到25毫希沃特所需时间:

8.858e+03 秒

1.476e+02 分钟

2.461e+00 小时

1.025e-01 天

2.807e-04 年

放射源: Am-241 (ionAm241.out)

事件数 (N): 100,000

器官数量: 187

总质量: 60.001834 kg

总吸收能量: 1.876764e-10 J

加权平均剂量: 3.127844e-17 Gy/source

加权平均剂量: 0.000031 pGy/source

1居里活度下的剂量率: 1.157e-06 Gy/s

达到25毫希沃特所需时间:

2.160e+04 秒

3.600e+02 分钟

6.001e+00 小时

2.500e-01 天

6.845e-04 年

注: 1 Gy = 1 J/kg, 1 pGy = 10^{-12} Gy

剂量计算基于ICRP145人体模型和空气介质

计算假设: 放射源活度 = 1居里 = 3.7×10^{10} Bq, 目标剂量 = 25 mSv = 0.025 Sv

对于光子辐射, 假设辐射权重因子 $w_R = 1$, 因此 1 Gy ≈ 1 Sv

IV. 结论

本实验本研究通过仿真实验，成功验证了莫塞莱定律在宽广原子序数范围内的有效性，并深入探究了 X 射线在物质中的衰减规律。核心创新在于提出并计算了有效反应电荷 Y ，该物理量将宏观衰减系数与原子微观结构参数（原子序数 Z 、入射光子波长 λ ）通过公式 $k \propto YZ^4\lambda^3$ 定量关联，实现了对光电截面 Z^4 标度律的物理修正。实验测得 Y 值随 Z 增加而非线性增长，这反映了内层电子波函数、屏蔽效应等量子力学因素对光电吸收截面的综合影响。

本报告对未来研究具有明确的指导意义：首先，有效反应电荷 Y 作为一个桥梁性参数，可被进一步用于构建针对合金、化合物等复杂材料的等效衰减模型，简化辐射屏蔽设计。其次，研究揭示的衰减系数与波长的 λ^3 依赖关系（标度指数 2.917），为发展快速、无需数据库的 X 射线衰减预测算法提供了理论基础。最后，人体吸收剂量的模拟结果强调了在辐射防护中必须考虑核素特异性，而有效反应电荷概念可扩展用于评估复合材料对人体的辐射屏蔽效能。后续工作可将此概念与第一性原理计算结合，从电子能级结构层面阐释 Y 的物理起源，并将其应用于新型防护材料或高灵敏度探测器材料的理性设计之中。

参考文献

- [1]. 《近代物理实验》(第四版)(普通高等教育国家级规划教材) – 吴思诚, 荀坤 – 4, 2015 –
高等教育出版社
- [2]. NIST Atomic Spectra Database, Version 5.10 – A. Kramida, Yu. Ralchenko, J. Reader, and NIST ASD Team – 2022 – National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, MD.
- [3]. 《现代原子物理学》(第二版) – 王义遒 – 2014 – 北京大学出版社.

V. 附录

1、K α 谱线的相对论修正

直接使用玻尔模型估计得到的K α 谱线和实验值有 10^{-2} 量级的偏差，且原子序数越大该偏差也越大。这是由于重核的芯电子运动速度和光速可以相比拟，因而计算时必须考虑相对论效应。

考虑狄拉克方程

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = [c\alpha p + \beta mc^2 + V]\psi$$

其中 $(\beta, \vec{\alpha})$ 是4分量的狄拉克矩阵；外势取库伦势 $V(r) = -\frac{ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}$ 。

对于球对称外势，波函数可以写成

$$\psi = \begin{pmatrix} f(r)\Omega_{jlm}(\theta, \phi) \\ ig(r)\Omega_{jl'm}(\theta, \phi) \end{pmatrix}$$

其中 Ω 是旋量球谐函数； $j = l \pm \frac{1}{2}$ 是总角量子数（这个 $1/2$ 就来自电子自旋）， l 是轨道角动量量子数， m 是总磁量子数。 l 和 l' 一个是 $j + \frac{1}{2}$ ，一个是 $j - \frac{1}{2}$ 。

定义自旋-轨道量子数

$$\kappa = \begin{cases} l, j = l + \frac{1}{2} \\ -(l' + 1), j = l' - \frac{1}{2} \end{cases}$$

则波函数满足的方程可以得到两耦合的微分方程组：

$$\begin{cases} \frac{df}{dr} = -\frac{\kappa + 1}{r}f + \frac{E - mc^2 + V(r)/c}{\hbar c}g \\ \frac{dg}{dr} = -\frac{\kappa - 1}{r}g + \frac{-E - mc^2 + V(r)/c}{\hbar c}f \end{cases}$$

可约化为二阶微分方程

$$\frac{d^2f}{dr^2} + \left[\frac{(E - V)^2 - (mc^2)^2}{\hbar^2 c^2} - \frac{\kappa(\kappa + 1)}{r^2} + \frac{1}{\hbar c} \frac{dV}{dr} \frac{\kappa}{r} \right] f = 0$$

库伦势下无量纲化方程，令

$$\rho = \frac{2\lambda r}{\hbar}, \quad \lambda = \frac{\sqrt{m^2 c^4 - E^2}}{c}, \quad \nu = \frac{Ze^2 E}{4\pi \varepsilon_0 \hbar c \lambda}$$

波函数形式设为

$$f(r) = r^\gamma e^{-\rho/2} L(\rho)$$

则 $r \rightarrow 0$ 的情形由 γ 主导。 $r \rightarrow 0$ 时方程简化为

$$\frac{d^2 f}{dr^2} + \frac{\kappa^2 - (Z\alpha)^2}{r^2} f = 0$$

取 $f \sim r^s$ 的试探解得到

$$s(s+1) + \kappa^2 - (Z\alpha)^2 = 0$$

结合试探解形式，应当取波函数在 $r = 0$ 有限的正则解，即

$$\gamma = \sqrt{\kappa^2 - (Z\alpha)^2}$$

带回试探解 $f(r) = r^\gamma e^{-\rho/2} L(\rho)$ ，得到合流超几何方程

$$\rho \frac{d^2 L}{dr^2} + (2\gamma + 1 - \rho) \frac{dL}{dr} + \left(\nu - \gamma - \frac{1}{2} \right) L = 0$$

其解是合流超几何函数 $F_1 \left(-\nu + \gamma + \frac{1}{2}; 2\gamma + 1; \rho \right)$ ，为保证波函数在无穷远处收敛

要求截断为多项式，即

$$-\nu + \gamma + \frac{1}{2} = -n_r$$

这里的整数就是径向量子数。将无量纲化参数带回，则得到

$$E = mc^2 \left[1 + \left(\frac{Z\alpha}{n_r + \gamma + 1/2} \right)^2 \right]^{1/2}$$

定义主量子数 $n = n_r + |\kappa|$ ，就得到狄拉克能级公式

$$E = mc^2 \left[1 + \left(\frac{Z\alpha}{n - (j + 1/2) + \sqrt{(j + 1/2)^2 - (Z\alpha)^2}} \right)^2 \right]^{1/2}$$

或在非相对论极限下展开，

$$E = mc^2 \left[1 - \frac{1}{2} \left(\frac{Z\alpha}{n} \right)^2 - \frac{(Z\alpha)^4}{2n^3} \left(\frac{1}{j + 1/2} - \frac{3}{4n} \right) + O(\alpha^6) \right]$$

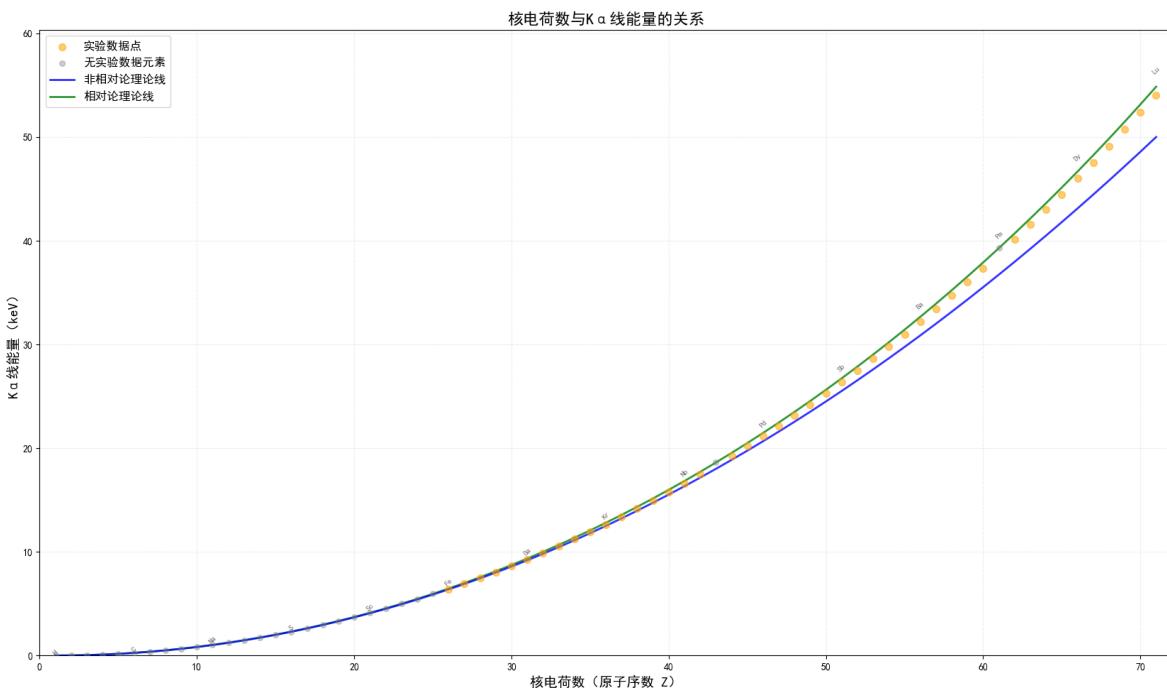
第一项是电子静能，第二项就是常见的波尔项，第三项是旋轨耦合项。

考虑到内层电子屏蔽作用，则只需要把上式中核电荷数 Z 修正为 $Z - \sigma$ ，其中 σ 是屏蔽系数，对于K α 线通常取 $\sigma = 1$ （教科书取法；本次模拟实验数据更接近 $\sigma = 2$ ）。即

$$E = mc^2 \left[1 + \left(\frac{(Z - \sigma)\alpha}{n - (j + 1/2) + \sqrt{(j + 1/2)^2 - (Z\alpha)^2}} \right)^2 \right]^{1/2}$$

相对论效应还带来旋轨耦合，使得L层电子分裂为 $j = 1/2$ 的2P_{1/2}轨道和 $j = 3/2$ 的2P_{3/2}轨道，其中 $j = 1/2$ 的态有两个、 $j = 3/2$ 的态有四个，因此最后得到的K α 谱线能量应是其加权平均。在莫塞莱实验中无法区分这两个精细能级，但其他实验有机会分辨这两条谱线。

与之相对的，质心修正等和原子序数相关的修正只有 10^{-3} 以下的量级，故直接予以忽略。下图中可以看到相对论修正相比于非相对论方法能够更好地预言谱线能量；图中相对论理论线的偏移可能是由于屏蔽系数不正确导致的。



图V.1.1. 相对论理论和非相对论理论与数据的对比

上述报告中采取的理论线均使用相对论理论的预言。

2、三次反比吸收率的近似推导

实验中X射线吸收截面的经验公式 $\sigma \propto Z^n E^{-m}$, 其中通常有 n 在4~5之间、 m 在3~3.5之间。下面将给出 $m = 3.5$ 近似率的推导。

本实验中采取铝板吸收其他原子的K α 特征谱线。由于铝的原子系数较小, 其自身的K α 谱线低于所有实验谱线(同时其1s芯电子跃迁到自由态的能量也低于所有实验谱线), 同时实验谱线远低于电子质量, 因此起主要效应的项是光电效应项; 铝的K吸收边在1.56keV, K边效应不明显, 可以直接近似地认为K壳层电子跃迁到自由态是主要的吸收过程。

费米黄金法则:

$$\Gamma = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle f | H | i \rangle|^2 \rho_f$$

反应截面定义为

$$\sigma = \frac{\Gamma}{F}$$

其中 $F (= c/V)$ 是光子流(其中归一化因子已经包含在 V 中)。

散射哈密顿量:

$$H = -\frac{e}{mc} \vec{A} \cdot \vec{p} + \frac{e^2}{2mc^2} A^2$$

对于单光子过程, 仅第一项有效果。

在单频成分下,

$$\vec{A} \cdot \vec{p} = -i\omega m(\hat{\epsilon} \cdot \vec{r})$$

其中 $\hat{\epsilon}$ 是偏振方向。因此有效散射哈密顿量可以写成

$$H = ie \sqrt{\frac{2\pi\hbar\omega}{V}} (\hat{\epsilon} \cdot \vec{r}) e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}}$$

对于铝原子, K壳层电子的典型半径(利用玻尔模型估计)为0.049Å, L层为0.31Å。与之对比地, 实验中波长最短的X射线波长约为0.56Å, 因此对于K层主导的光电效应可以采取电偶极近似($\lambda \gg r$, 则此时电磁场在研究范围中可以视为均匀时变

场）。该近似下 $e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} \approx 1$, 最后能够写出散射哈密顿量

$$H_{\text{eff}} \approx ie \sqrt{\frac{2\pi\hbar\omega}{V}} (\hat{\epsilon} \cdot \vec{r})$$

系统初态为原子1s轨道, 忽略相对论效应, 同时因为1s电子以内没有更内层的电子了, 可以忽略屏蔽, 因此直接采取类氢1s轨道解:

$$\psi_i = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} e^{-\frac{Z}{a_0}r}$$

其中 $a_0 = \frac{\hbar}{m_e c \alpha}$ 是玻尔半径。

末态为某个自由态, 在铝金属中直接近似为自由电子, 则

$$\psi_f = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{p}_f \cdot \vec{r}}$$

能量守恒要求 $E_f = -E_K + \hbar\omega$, $|\vec{p}_f| = \sqrt{2mE_f}$, 其中 $-E_K$ 是初态能量 (E_K 是K层电子结合能), ω 是X射线圆频率。

跃迁矩阵元 (使用Mathematica符号计算)

$$M_{fi} = \langle f | H | i \rangle = e \sqrt{\frac{2\pi\hbar\omega}{V}} \frac{1}{\sqrt{\pi V}} \zeta^{\frac{5}{2}} \cdot 32\pi \frac{\hat{\epsilon} \cdot \vec{q}}{(q^2 + \zeta^2)^3}$$

其中 $\zeta = Z/a_0$ 是1s轨道特征半径; $\vec{q} = \frac{1}{\hbar} \vec{p}_f$ 。

对于非极化光子, $\langle |\hat{\epsilon} \cdot \hat{q}|^2 \rangle = 1/3$, 因而

$$\langle |M_{fi}|^2 \rangle = \frac{2048\pi^2}{3} \frac{\hbar e^2 \omega}{V^2} \frac{q^2 \zeta^5}{(q^2 + \zeta^2)^6}$$

末态自由电子的态密度 (对 $d\vec{p}_f$) 是 $\frac{V}{(2\pi\hbar)^3}$; 考虑到最后的态密度是对 ω 的, 使用链式求导法则得到

$$\rho_f(\omega) = \rho_f(\vec{p}) \left| \frac{d\omega}{d\vec{p}} \right|^{-1} = \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} \left| \frac{d \frac{1}{\hbar} \left(E_K + \frac{p^2}{2m} \right)}{d\vec{p}} \right|^{-1} = \frac{Vm}{2\pi^2 \hbar^2} p_f$$

整理得到反应截面的最终结果

$$\sigma = \frac{2048\pi}{3} \frac{me^2\omega}{\hbar^2 c} \frac{q^3 \zeta^5}{(q^2 + \zeta^2)^6}$$

高能极限下 ($\hbar\omega \gg E_K$, 即 $q \gg \zeta$; 本实验中最低能量Ti的K α 谱线4.51keV, 而铝的K层吸收边能量为1.56keV, 勉强符合近似条件), K边效应不明显, 因此可以直接受似认为 $E_f = \hbar\omega$, $q = \sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}}$, 最后得到

$$\sigma = \frac{2048\pi}{3} \frac{me^2\omega}{\hbar^2 c} q^{-9} \zeta^5$$

注意到 $q \propto \omega^{1/2}$, $\zeta \propto Z$, 可以得到 $\sigma \propto Z^5 \omega^{-7/2}$, 即 $n = 5, m = 3.5$ 。这和实验上的经验定律 $n = 4, m = 3$ 非常接近。具体算式为

$$\sigma = \frac{64\sqrt{2}\pi}{3} \alpha \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{-7/2} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^5$$

作为对比, 若初态为2s轨道, 即

$$\psi_i = \frac{1}{\sqrt{8\pi}} \left(\frac{Z}{2a_0}\right)^{3/2} \left(1 - \frac{Z}{2a_0}r\right) e^{-\frac{Z}{a_0}r}$$

跃迁矩阵元

$$M_{fi} = e \sqrt{\frac{2\pi\hbar\omega}{V}} \frac{1}{8\sqrt{\pi V}} \zeta^{\frac{5}{2}} \cdot 32\pi(\hat{\epsilon} \cdot \vec{q}) \left[\frac{1}{(q^2 + \zeta^2)^3} - \frac{3\zeta^2}{(q^2 + \zeta^2)^4} \right]$$

高能极限下反应截面为1s轨道的1/8, 已经是较为次要的贡献了。需要指出的是, 对于高层电子, 电偶极近似可能不再适用了。

VI. 思考题

(一) 预习思考题

1、实验中的内层电子空穴是如何产生的? 是否还可能有其他的方法?

实验中使用高能电子将K层电子轰击到非束缚态, 产生空穴。实验中也可以使用高能X射线等方式来产生空穴。

2、实验中是如何测量X射线的频率的? 是否还有其他方法?

模拟实验使用电子处理的道数作为相对频率; 莫塞莱使用X射线的晶体布拉格衍射

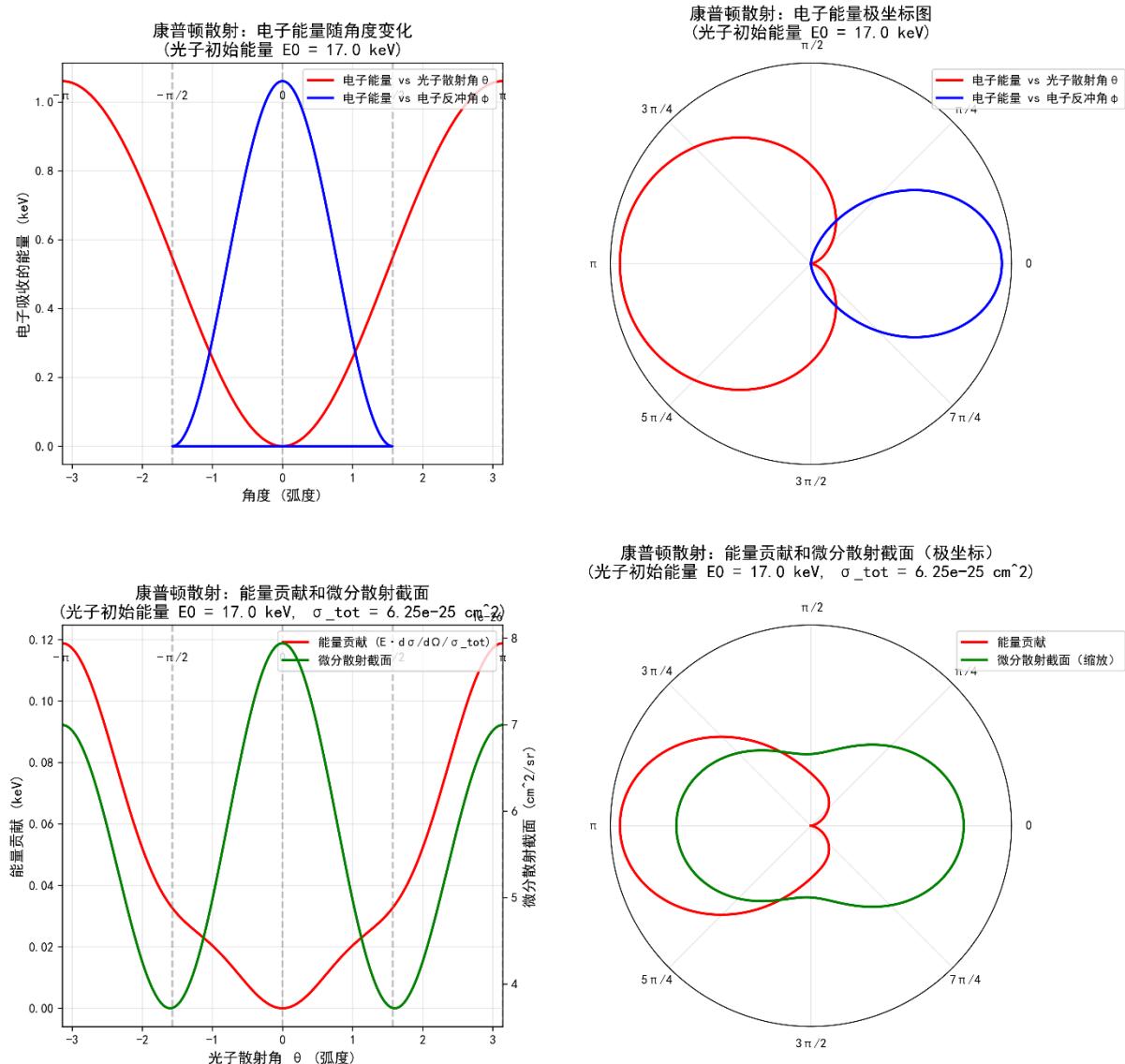
作为测量频率的方法。也可以使用康普顿散射来测量X射线能量。

3、 $dI/I = -\mu_0 dx$ 的成立条件是什么？

需要窄束、单能X射线在均匀介质中传播，且光强不能过于强。

4、估算17keV能量的光子经康普顿散射后最多会损失多少能量？

电子获得的平均能量：0.5271 keV



图VI-1.4.1. 康普顿散射中电子获得的能量

(二) 实验过程思考题

1、实验中锶样品和硒样品分别用的是醋酸锶和氧化硒，请问这对实验结果会产生什么影响？为什么？

原子的化学环境改变了内层电子的有效结合能。无论是因为失去电子还是电子云被吸引走，结果都是锶/硒原子整体的价电子屏蔽效应减弱。因此，内层电子（如1s电子）会感受到更强的有效核电荷 Z_{eff} 。这个增强的 Z_{eff} 意味着内层电子结合能增加，要将内层电子电离出去需要更多的能量；同时特征X射线能量增加。

2、在做验证莫塞莱定律实验时应该先用哪一种靶样品？为什么？

应该选取Z在30左右的元素，其信号足够强，同时L线等谱线的干扰较少，容易看到清晰的信号。

3、在做吸收实验时，X射线的强度如何测量？能否用峰位附近一定道址范围内的总计数表示强度？为什么？如果能，道址范围该如何确定？

本实验中用事件数之比确定X射线的相对强度，这里使用的“事件数”已经采取了高斯峰 3σ 以内的数据来排除其他峰或 λ^3 率带来的额外峰。

4、在做吸收实验时，X射线的谱峰形状会随铝吸收膜的厚度而变化，为什么？应该用什么方法测量，才能比较吸收膜厚度不同时的X射线强度？

该效应仅在Fe和Ti的谱线上观察到了这一现象；其余元素的峰频率漂移不明显。这是因为这两种元素的谱线靠近铝的K吸收边，不同频率吸收率相差较大，导致主峰被强烈吸收而“拖尾”吸收不明显造成其相对强度大，极端情形下可能出现新的峰（思考题6的现象来源。）

5、A1膜厚度为零时的 I_0 该如何测量？

直接测量即可。

6、见4

（三）实验报告思考题

1、根据实验测得的 τ_m 值，计算原子光电吸收截面 σ_a 的大小；原子的汤姆孙散射截面为 $8\pi r_e^3 Z/3$ ，其中 r_e 为电子的经典半径， $r_e = e^2 / 4\pi\epsilon_0 m_e c^2$ ，试估计汤姆孙散射对结果的

影响。

$\sigma_a \sim 10^{-20} \text{m}^2$ (详见正文)，而汤姆逊截面 $\sim 6.65 \times 10^{-29} \text{m}^2$ ，影响相当小。

2、对于实验中不同元素所发射的标识X射线，计算NaI(Tl)闪烁探测器的能量分辨。试解释为什么光子能量越小， $\Delta E/E$ 越大。

能量的计算大约是依赖闪烁晶体将 E 光子转变为 N 个可见光光子，而这些光子的探测是符合泊松分布的。因此 E 越小， N 越小，探测标准差就随着 $1/\sqrt{N}$ 变大。