話題・解説(Ⅰ)

EGS4 コードにおける低エネルギー光子の取り扱い と原子分子データの評価

高エネルギー加速器研究機構(KEK)

波戸 芳仁*、平山 英夫

*e-mail: yoshihito.namito@kek.jp

私たちのグループでは EGS4 コード[1]の低エネルギー光子輸送部分の改良を 行っています。本稿では、最近4年ほどの間に行った改良について述べます(そ れ以前の改良については文献[2]を参照して下さい)。改良点を列挙すると、i) L-X 線 ii) 電子衝突電離 iii) オージェ電子 iv) 化合物・混合物からの X 線とオージ ェ電子、等です。次に、これらの改良の妥当性を検討するために行った計算と実 験の2つの系統的な比較について述べます。比較は、i) 20~40 keV放射光散乱 実験 と ii) 電子ビームによって発生する K-X 線強度、について行いました。計 算と実験とは多くの場合よく一致しました。明らかに両者が食い違う場合があり、 原子・分子データの精度を向上させる必要があることがわかりました。

1 序論

EGS4 コードの低エネルギー光子輸送の改良をほぼ 10 年間行ってきました。1997 年に EGS4 コードに関する国際研究会を高エネ研で開催し、それまでの改良をまとめて発表し ています。この時点での改良項目は、次の通りです。

- 直線偏光光子散乱 [3]
- コンプトン散乱におけるドップラー広がり[4]
- L-X 線 [5]
- 電子衝突電離 [6]

この国際研究会後の4年間の改良点は次の通りです。

- Ⅰ-X 線の取扱いの改良
- 電子衝突電離の取扱いの改良

オージェ電子

化合物・混合物からの X 線とオージェ電子

これらの改良はEGS4コードの次期版であるEGS5コードに組み込まれる予定です。第2 節で、これらの改良について述べます。

改良の妥当性を検討するために実験と EGS4 コードの 2 つの系統的な比較を行いました。第3節でこれらの比較について述べます。最初の比較は「20-40 keV 放射光散乱実験」です。ターゲットは C、Cu、Ag と Pb であり、コンプトン、レイリー散乱光子、K-X 線、L-X 線などを Ge 検出器で測定しました。Gd ターゲットからの L-X 線も測定しました。

2番目の比較は、「電子ビームによって発生する K-X 線強度」です。10-3000 keV の電 子ビームがターゲット (Al、Ti、Cu、Ag と Au) に垂直に入射した際に発生する K-X 線 の強度を 120° と 180° 方向で米国のグループが測定しています。電子ビームが Cu と Sn ターゲットに入射した時に発生する光子のスペクトルについても比較を行いました。これ までの改良版はインターネットで入手可能です。プログラムは [7] に、マニュアルは [8, 9] にあります。

2 プログラムの改良

2.1 L-X 線

2.1.1 L 副殻光電断面積比のエネルギー依存

1996年に L-X 線の計算を始めたときには、L 吸収端での L 副殻光電断面積比を用い、 そのエネルギー依存は無視していました [5]。その後、この近似のために無視できない誤 差が生じることがわかったため、Matese と Johnson の L 副殻光電断面積計算値 [10] を 用いて、エネルギー依存を導入しました。

2.1.2 実験値に基づく L-X 線放出率ライブラリー

1996 年版の計算では Scofield の計算による K-X と L-X 線放出率ライブラリーを用いて いました [5]。現在は Salem 等の実験値に基づく K-X と L-X 線放出率ライブラリーを用 いています [12]。 この変更によって、EGS4 と実験との一致がよくなりました。

2.1.3 局所外そう法

吸収端エネルギーと近いエネルギーを持つ X 線の過小評価を避けるため 2 つの改良を 行いました。

- 1. 区間毎直線内そうの改良
 - 吸収端を含む区間では、全断面積が急激に変化するため、直線内そうが破綻します。 このためその区間では、隣の区間からの直線外そうによって全断面積を評価するよ うにしました。詳しくは文献 [13] をご覧下さい。
- 2. 光子のエネルギー区間数を 200 から 1000 に増やしました。

2.2 電子衝突電離

1999年に電子衝突電離(EII)をEGS4コードに組み込みました[6]。その後、EGS5コードに組み込めるよう次の改良を行っています。

1. 光電効果の後の緩和過程と共通のサブルーチンで K-X 線の計算を行う。

2. 化合物・混合物中の任意の元素の EII を取り扱う。

これと同時に、光電効果に関連する現象の扱いを変更したため、EIIの計算方法が次の 点で変わりました。

- 1. 蛍光収率のデータを文献 [14, 15] から文献 [16, 17] に変更しました。新旧の蛍光収 率の比を図 1 に示します。
- 2. 以前は K_β 線を過小評価するおそれがありました。局所外そう法と光子エネルギー 区間数を増やしたことにより過小評価の程度をきわめて小さくしました。
- 3. K-X 線のエネルギーの数を4から10に増やしました。

2.3 オージェ電子

オージェ電子の計算を EGS4 コードに追加しました。データと計算方法については文献 [9] を参照して下さい。

Guadala 等が、BNL で単色化放射光を Al と Ti ターゲットに入射させ、放出される電子のエネルギースペクトルを測定しています [18]。彼等は、前方 10°の範囲に放出される 電子を 3%のエネルギー分解能で測定しています。私たちはこの実験を EGS4 コードでシ ミュレートしてみました。光子エネルギーは実測されていないため、コンプトン反跳電子 エネルギーを再現するよう逆算して調整しました。測定と計算の比較を図 2 に示します。 EGS4 は Al ターゲットからのオージェ電子を過小評価します。EGS4 は Ti ターゲットからのオージェ電子をよく再現しています。

2.4 化合物・混合物からの X 線とオージェ電子

化合物・混合物からの X 線とオージェ電子を計算するには、化合物・混合物中の各元素の光電断面積が必要です。EGS4 コードの計算のための断面積などを準備する PEGS4 コードを変更し、各元素の光電断面積比をエネルギーの関数として出力するようにしました。光電効果発生時にこの比を用いて、どの元素の光電効果かを選択するように EGS4 コードも変更しました。ある元素の光電効果がおきた後の計算手順は従来と同じです。計算方法の詳細については文献 [9] をご覧下さい。

表 1: 入射光子エネルギーと直線偏光度

エネルギー (keV)	40	30	20
直線偏光度 (P)	0.885	0.877	0.873

表 2: ターゲットとその厚さ

ターゲット	С	Cu	Ag	Pb
厚さ (g/cm^2)	0.1325	1.79	0.525	0.568

3 測定と計算の系統的な比較

3.1 光子入射

私たちのグループで単色化放射光散乱実験を行っています。実験場所はフォトンファクトリー (PF) と呼ばれる高エネ研の 2.5 GeV シンクロトロン放射光施設のビームライン BL14C です。

実験配置を図3に示します。ウィグラー磁石から発生する光子をSi(1,1,1)2重結晶モ ノクロメータで単色化して用いました。

直線偏光単色光子が点 O に置いたターゲットで散乱されます。ターゲットの法線ベク トルは $\left(-\frac{1}{2}, -\frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{2}\right)$ です。散乱光子を $\theta = 90^{\circ}$ の方向に置いた2台の Ge 検出器で測定し ます。入射光子エネルギーと直線偏光度を表1に、ターゲットの材質と厚さを表2に示し ます。2台の Ge 検出器のうち、1台 (Ge-2) は入射光子の偏光ベクトルを含む平面内に、 もう一台 (Ge-1) はそれと垂直の方向においてあります。ターゲットは真空容器内に置き、 真空容器と Ge 検出器の間には真空パイプを置いて空気による散乱を防いでいます。開口 部直径 5.01 mm のコリメータを Ge 検出器の前に置きました。(C_1 、 C_2). ターゲット表面 からコリメータまでの距離は 420 mm です。コリメータ開口部角度 (0.33°) によるコンプ トン散乱光子エネルギー広がりは 40 keV 入射に対して 31 eV と無視できる値です。(こ こではまだ、ドップラーブロードニングを無視しています。)入射光子強度は自由空気電 離箱でモニターしています。なお、この自由空気電離箱は事前にカロリメータに対して校 正がなされています [19]。

EGS4 コードによる計算は2段階に分割して行いました。第一段階では、光子ビームを ターゲットに入射させ出てくる光子(A)をスコアします。第2段階では、この光子(A)を 線源にして Ge 検出器でのエネルギー吸収を計算します。光子スペクトルの測定値と計算 値を図4に示します。EGS4コードの計算によるスペクトルは Ge 検出器の分解能を模擬 するために、FWHM=0.3 keV のガウス関数でスミアしてから表示してあります。コンプ トン散乱ピークの形状と強度、レイリー散乱、K-X 線、L-X 線の強度などが EGS4 コー ドの計算でよく再現されています。

測定と計算の比を図 5 に示します。L-X 線強度の比較では、Gd ターゲットからの強度 の予備的な結果も示してあります。コンプトン散乱については $|C/M - 1| \sim 0.03$ 、レイ リー散乱、K-X 線、L-X 線についてはそれぞれ 0.6、0.04、0.15 でした。(ここで「C」は 計算、「M」は測定を示し、|C/M - 1|は両者の比の1からのずれを示します。)

3.2 電子ビーム入射

次の3つの測定をシミュレートしました。

- Dick 等は、10、20、40、100、200、500、1500 そして 3000 keV の電子ビームが ターゲット (Al、Ti、Cu、Ag そして Au) に垂直に入射した時の K-X 線強度を測定 しています [20]。彼等は入射電子 1 個あたりの K-X 線強度を θ = 120° と 180° で 測定しています。
- 2. Acosta 等は 20 keV の電子ビームが Cu ターゲットに垂直入射した時に $\theta = 140^{\circ}$ 方 向に発生する光子のスペクトルを Si 検出器で測定しています [23]。
- 3. Placious は 100 keV 電子ビームが Sn ターゲットに垂直入射した時に $\theta = 70^{\circ}$ と 140° 方向に発生する制動輻射と K-X 線スペクトルを測定しています [21, 22]。

EGS4 コードによる計算では EII を含める場合と含めない場合の両方で行いました。K 殻 EII 断面積として Gryziński の相対論的断面積を用いました [24]。測定と計算の規格化 は行わず、すべて入射電子1個あたりで比較を行いました。

Acosta の測定のシミュレーションでは2段階計算を行いました。第一段階ではターゲットから θ =125-135°方向に出る光子をスコアし、第2段階ではこの光子を入射粒子として、Si検出器中でのエネルギー付与を計算しました。Si検出器前面の吸収層として、Be窓 (7 μ m)、Au 電極 (0.02 μ m)、Si の不感層 (0.1 μ m) を考慮して計算を行いました。

3.2.1 K-X 線強度

K-X 線強度の測定と実験の比較を図 6 に示します。計算の統計誤差は、EII を考慮した EGS4 計算では 3%以内、EII を無視した EGS4 計算のうちの Al と他のターゲットについ てそれぞれ 10%と 5%以内です。K-X 線強度の C/M の幾何平均を表 3 に示します。ここ で、Casnati の断面積 [25, 26] を用いて EII を考慮した EGS4 計算の結果も示してありま す。Casnati の断面積を用いると、Gryziński の断面積を用いる場合よりも、計算と実験 の一致は少し悪くなりました。

EII を考慮しない EGS4 の計算は Z が小さいターゲットで明らかに過小評価でした。Al と Au でそれぞれ C/M は 0.0027 と 0.85 でした。この過小評価の程度は入射電子エネル ギーと K-X 線放出方向にあまり依存しませんでした。

電子ビームが Al、Ti、Cu そして Ag ターゲットに入射した時の K-X 線の主な起源は EII です。一方、電子ビームが Au ターゲットに入射した時の K-X 線の主な起源は制動輻 射光子による光電効果です。

以上のことについてこれまでに系統的に論じた論文はなさそうで、私たちの研究により 初めて説明できました。

表 3: K-X 線強度 C/M の幾何平均。Gr と Ca はそれぞれ Gryziński と Casnati の断面 積を計算に用いたことを示しています。

ターゲット	Al	Ti	Cu	Ag	Au	Av
EGS4	0.0027	0.023	0.053	0.31	0.85	0.061
EGS4+EII(Gr)	0.96	1.12	0.86	0.91	1.07	0.98
EGS4+EII(Ca)	1.16	1.40	1.18	1.11	1.16	1.21

3.2.2 Cu ターゲットからの光子スペクトル

20 keV 電子が Cu ターゲットに垂直入射した時に放出される光子スペクトルの測定値と計 算値を図 7 に示します。制動輻射の低エネルギー部分 (1-7.6 keV)、K-X 線 (7.6-9.2 keV)、 制動輻射の高エネルギー部分 (9.2-20 keV) の光子数の C/M は、それぞれ 0.92、0.83 と 0.85 でした (EII を考慮した計算)。EII を無視すると K-X 線部分の光子数の C/M=0.07 でし た。Si 検出器の分解能を模擬するために EGS4 コードによる計算結果は FWHM=1.6 keV のガウス関数でスミアリングをしてあります。

3.2.3 Sn ターゲットからの光子スペクトル

100 keV 光子垂直入射時に Sn ターゲットから放出される光子のスペクトルを図 8 に示 します。K-X 線を含む 10.0-36.0 keV の部分について、 $\theta = 70^{\circ} \ge \theta = 110^{\circ}$ での光子数の C/M はそれぞれ 0.74 \ge 0.88 でした。(EII を考慮) 一方、EII を無視すると C/M=0.52 お よび 0.67 でした。

NaIを測定に用いているため、Acostaの測定に比べて分解能が悪く、制動輻射が K-X線のエネルギー領域に多く含まれています。このため EII 有り/無しの差が小さくなりました。

なお、NaI 検出器の分解能を模擬するため FWHM=8 keV のガウススミアを計算値に 適用してあります。

4 議論

4.1 光子ビーム入射

4.1.1 レイリー散乱

図 5(b) に示すように、レイリー散乱強度の測定と計算は 1.5 倍かそれ以上違います。これは、干渉の影響です。

Morin は干渉を考慮した水のフォームファクタを計算しています [27]。C と Pb ターゲットについては同様の手法が有効かもしれません。

4.1.2 L-X 線

図 5(d) に示すように Gd と Ag ターゲットについて M/C~1.07 と 0.85 です。測定と 計算の両方から誤差要因を考えてみます。

Ag の L-X 線は 2.5-4 keV と低エネルギーであるため、今回の光子入射の系統的な測定 で最も困難な部分でした。Ge 検出器の効率は光子エネルギーに依存して大きく変化し、 Ge 検出器前にある空気層やカプトン膜による減衰も有意です。Gd の L-X 線のデータは 予備的な物です。

L 殻蛍光収率 $(\Omega_{L_1}, \Omega_{L_2} \geq \Omega_{L_3})$ の公称誤差は Ag についてそれぞれ 30-20、25-10 と 20-10%、Gd について 15、10-5 と 5% です [16]。これらの値から M/C の 1 からのずれを 十分説明できます。この誤差はかなり大きく、今後よりよい評価が必要です。

4.2 EII

Dick の K-X 線強度測定と EGS4 コードによる計算の 62 の比較のうち 41 のケースでは |C/M - 1| は 0.15 以内でした。測定と計算の食い違いの最大の要因は EII 断面積の誤差 であろうと考えています。今後よりよい EII 断面積評価値が必要です。

Dick の測定と EGS4 計算の比較の中で、20 keV 電子が Cu ターゲットに垂直入射する 時に $\theta = 120^{\circ}$ 方向に放出される K-X 線強度の C/M は 0.79 でした。一方、Acosta の測 定と EGS4 計算の比較では K-X の C/M は 0.83 でした。これらの C/M が近いことから 実験値同士がコンシステントだと言えます。

Acostaの測定とEGS4コード計算の比較において、制動輻射光子の高エネルギー部分 を過小評価しています。同様の過小評価はPlaciousの測定との比較でのSnターゲットか らの制動輻射光子の高エネルギー部分でも現れています。よりよい制動輻射光子生成断面 積を計算に用いることで、これらの過小評価を解決できると考えています。

5 結論

EGS4 コードの改良の妥当性を検討するため 2 つの系統的な比較を行いました。最初の 比較は "20-40 keV 単色化放射光散乱実験"です。ターゲットは C、Cu、Ag と Pb であり、 コンプトン、レイリー散乱、K-X 線と L-X 線を Ge 検出器で測定しました。Gd ターゲッ トからの L-X 線も測定しました。EGS4 と測定は全般的によく一致しました。コンプト ン、レイリー散乱、K-X 線、鉛の強い L-X 線と弱い L-X 線に対して $|C/M - 1| \sim 0.03$ 、 0.6、0.04、0.03 そして 0.5 でした。コンプトン散乱についてはピークの形状もよく一致し ました。

ターゲットに 0.01 から 3 MeV の電子ビームが垂直に入射したときに発生する K-X 線 強度の測定と計算の系統的な比較を行いました。測定と計算はよく一致し、EGS4 コード の改良の妥当性を確認することができました。Al、Ti、Cu と Ag ターゲットについては

表 4: EGS4 における低エネルギー光子の取扱いに関して完了した項目と今後の課題

完了	課題
直線偏光	レイリー散乱への干渉の影響
束縛、ドップラー広がり	弱 L-X 線放出比
$Z \ge 70$ の強L-X線(L- α, β, γ)	$ m Z{<}70$ の $ m L$ 殻蛍光収率 $\Omega_{ m L}$
K 殼電子衝突電離	20≤Z≤30のK 殻蛍光収率Ω _K
EGS4-KEK 改良の統合	オージェ電子:測定との系統的比較
	K 殼電子衝突電離断面積

K-X線の主な起源はEIIであり、AuターゲットについてはK-X線の主な起源は制動輻射 光子による光電効果でした。

EGS4における低エネルギー光子の取扱いに関して、完了した項目と今後の課題を表 4 に示します。これらの課題はいずれもよりよい原子分子データ評価値を必要とするもの です。

参考文献

- W. R. Nelson, H. Hirayama, D. W. O. Rogers, SLAC-265 (Stanford University, Stanford, 1985)
- [2] Y. Namito, H. Hirayama and S. Ban, "Improvements of Low-Energy Photon Transport in EGS4", In 1st International Workshop on EGS4, Japan, Aug. 26-29 1997 ed. by. H. Hirayama, Y. Namito and S. Ban, KEK Proc. 99-16, (1997) pp.32-50
- [3] Y. Namito, S. Ban and H. Hirayama, Nucl. Instrum. and Meth. A 332(1993)277.
- [4] Y. Namito, S. Ban and H. Hirayama, Nucl. Instrum. and Meth. A 349(1994)489.
- [5] H. Hirayama, Y. Namito and S. Ban, "Implementation of an L-Shell Photoelectron and an L X-ray for Elements into the EGS4 Code", KEK Internal 96-10 (1996).
- [6] Y. Namito and H. Hirayama, Nucl. Instrum. and Meth. A423(1999)238.
- [7] http://ccwww.kek.jp/kek/rad/egs4/lowen.html
- [8] Y. Namito and H. Hirayama, "LSCAT: Low-energy Photon-scattering Expansion for the EGS4 Code (Inclusion of Electron Impact Ionization)", *KEK Internal 2000-4* (2000).
- [9] H. Hirayama and Y. Namito, "General Treatment of Photoelectric Related Phenomena for Compounds and Mixtures in EGS4", KEK Internal 2000-3 (2000).
- [10] J. J. Matese and W. R. Johnson, *Phys. Rev.* 140(1965)A1.

- [11] J. M. Scofield, At. Data and Nucl. Data Tables 14(1974)121.
- [12] S. I. Salem and P. L. Lee, At. Data and Nucl. Data Tables 18(1976)233.
- [13] Y. Namito and H. Hirayama, "Improvement of the Cross-section and Branchingratio Evaluation in EGS4 in the Energy Interval Which Has an Absorption-edge", In 8th EGS4 Users' Meeting in Japan, Japan, Aug. 1-3 1999 ed. by. H. Hirayama, Y. Namito and S. Ban, KEK Proc. 99-15, (1999) pp.1-6.
- [14] Ed C. M. Lederer V. S. Shirley, *Table of Isotopes* 7th edn (Wiley-Interscience, New York, 1978).
- [15] W. Bambynek et al., Rev. Mod. Phys. 44(1972)716.
- [16] Ed V. S. Shirley, *Table of Isotopes* 8th edn. (Wiley-Interscience, New York, 1996).
- [17] W. Bambynek, post-deadline abstract published in the Proc. of the Conference on X-ray and inner-shell processes in atoms, molecules and solids, Leipzig, Aug 20-24 (1984).
- [18] N. A. Guadala et al., Nucl. Instr. Meth. A 347(1994)504.
- [19] H. Nakashima et al., Nucl. Instr. Meth. A **310**(1991)696.
- [20] C. E. Dick, A. C. Lucas, J. M. Motz, R. C. Placious, J. H. Sparrow, J. Appl. Phys. 44(1973)815.
- [21] R. Placious, J. Appl. Phys. **38**(1967)2030.
- M. J. Berger, In Monte Carlo transport of Electron and Photons, eds. T. M. Jenkins,
 W. R. Nelson and A. Rindi (Plenum, New York, 1988) pp.216, Figure 8.27b.
- [23] E. Acosta, X. Llovet, E. Coleoni, J. A. Riveros, F. Salvat, J. Apply. Phys. 83(1998)6038.
- [24] M. Gryziński, *Phys. Rev.* **138**, A 305, A 322, A 336 (1965).
- [25] E. Casnati, A. Tartari, C. Baraldi, J. Phys. B 15 (1982)155
- [26] E. Casnati, A. Tartari, C. Baraldi, J. Phys. B 16 (1983)505.
- [27] L. R. M. Morin, J. Phys. Chem. Ref. Data 11 (1982)1091.



図 1: EGS4 の高エネ研拡張版で使用している K 殻蛍光収率と、EGS4 で使用している K 殻蛍光収率の比



図 2: 電子スペクトルの比較。入射は単色化放射光。Guadala 等の測定と EGS4 による計 算をそれぞれ黒丸と実線で示す。ターゲットの材質、厚さ、入射光子エネルギーは (a) Al 48.1 nm、57.0 keV (b) Ti 68 nm、57.25 keV。入射光子エネルギーはコンプトン反跳電 子ピークを再現するように調整した。



図 3: 実験配置。直線偏光した単色化放射光がサンプル (S) で散乱され、2 台の低エネル ギー用高純度 Ge 検出器 (Ge-1、Ge-2) で散乱光子を測定する。 C_0 コリメータの開口部直 径は2 mm。自由空気電離箱 (FAIC) をサンプルの前に置き、入射光子数をモニタしてい る。サンプルは場所 O にその法線ベクトルが $\left(-\frac{1}{2}, -\frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{2}\right)$ を向くように置いてある。コ リメータ (C_1 、 C_2) が Ge に入射する光子の立体角を決める。サンプル表面からコリメー タ出口までの距離 (L_1) は 420 mm であり、コリメータ開口部直径 (D_1) は 5.01 mm で ある。



図 4: 光子スペクトルの比較。水平方向と垂直方向での測定値をそれぞれ黒丸と白丸で示 す。水平方向と垂直方向に対する EGS4 計算値を実線と破線で示す。ターゲット材質と入 射光子エネルギーは (a) C-40 keV (b) Cu-40 keV (c) Ag-20 keV (d) Pb-40 keV.



図 5: 各ピーク強度の M/C。 'H' と 'V' はそれぞれ水平と垂直を示す。(a) コンプトン散 乱 (b) レイリー散乱 (c) K-X 線 (d) L-X 線。



図 6: K-X 線強度の比較。Dick 等による測定を黒四角 ($\theta = 180^{\circ}$) および黒三角 ($\theta = 120^{\circ}$) で示す。EGS4: EGS4 (EII 無視); EGS4+EII: Gryziński の断面積を用いた EII 計算を含む EGS4 計算 (a) Al (b) Ti (c) Cu (d) Ag (e) Au.



図 7: 20 keV 電子が Cu ターゲットに垂直入射した時に $\theta = 130^{\circ}$ 方向に放出される制動 輻射光子と K-X 線。Acosta 等が Si 検出器で測定した値を黒丸で、EGS4 計算 (Gryziński の断面積による EII 計算を含む) と EGS4 計算 (EII 無視) をそれぞれ実線と破線で示す。



図 8: 100 keV 電子ビームが Sn ターゲットに垂直入射したときに (a) $\theta = 70^{\circ}$ と (b) $\theta = 120^{\circ}$ 方向に放出される制動輻射光子と K-X 線。Placious が NaI 検出器で測定した値 を黒丸で、EGS4 計算 (Gryziński の断面積による EII 計算を含む) と EGS4 計算 (EII 無 視) をそれぞれ実線と破線で示す。