

# X線에 의한 光電收率 計算에 關한 研究

大邱保健專門學校 放射線科

宋 在 寬

=Abstract=

## Calculation of Photoelectric Yield by X-ray

Jae Kwan Song

*Dept. of Radiotechnology, Dai Gu Junior Health College*

X-rays contribute to electron emission from material surfaces primarily through photoelectric interaction. A simple model is described for predicting the yield and energy spectrum of photon and Auger electrons emitted from materials exposed to X-ray with low energy.

In this paper, We have calculated the yield of primary, Auger, and secondary electrons. The results of the photoelectric yield model developed here suggests that.

I) The angular distribution of emitted electrons (Per unit angle) is proportional to  $\sin \theta \cos \theta$  for all electron energies and all components (Primary, Auger, or Secondary)

II) The shape of the energy spectrum of the photoelectric yield is independent of angle.

III) For this targets the forward and backward photoelectric yields are identical.

## 目 次

## I. 緒 論

- I. 緒 論
- II. 理 論
- III. 光電收率計算
- IV. 結 論
- V. Appendix
- 參考文獻

Soft-X-ray는 광전작용으로 인한 물질표면으로 부터의 전자방출에 상당히 관여하고 있다.

우리들은 여기서 광전자 수율을 계산하기 위하여 간단한 모델을 설정하고 그 모델로부터 광전수율을 예측하고 수율 스펙트럼도 계산하여 실험치와의 타당성을 검토하여 보고자 한다.

여기서 계산된 결과는 초기광자에 대한 수율  $Y_i$ 와

Auger 전자수율  $Y_a$ , 또한 2차전자에 대한 수율  $Y_s$  를 각각 계산하여 광전수율을 계산한 바 실험치와 잘 일치하므로 그 결과를 보고하고자 한다.

## II. 理 論

Soft X-ray로 인한 물질내부에서 발생하는 방출 전자는 초기전자에 대하여 너무나 잘 알려져 있고 Auger 전자에 대하여는 그렇지 않다.

대부분의 경우 Auger electron 방출에는 2~3 개의 궤도전자가 작용된다. 원자의 초기상태에서 어떠한 전자각에 하나의 공백상태 ( $V_0$ )가 생겼을때 최종상태는 전자각에 두개의 공백 즉  $X_p$  와  $Y_q$  가 생긴다.

여기의 p와 q는 부궤도를 나타낸다.

$V_0 \rightarrow X_p, Y_q$  는 어떠한 Auger 전이에 있어서 처음과 마지막 상태의 원자의 전리를 표현한다. 즉  $V_0$  는  $V_0$  각으로 부터의 전자에 의하여 채워진 초기공백 궤도이고 여기에서 방출된 ( $X_p$  궤도) 에너지는  $Y_q$  궤도로 전이되어 이 전자 ( $Y_q$  궤도)는 원자로 부터 방출되어 자유에너지 상태가 된다. 이때 이 전자를 Auger 전자라고 한다. 일반적으로 Auger 전자는  $\beta$ -Spectroscopy로서 잘 검출되나 L Auger 전자는 너무나 낮은 에너지를 갖고 방출하므로 高原子 번호 원소 ( $Z > 20$ )에서 만이 검출할 수 있다.

그러면 Auger 전자의 Energy 검출을 위한 방법을 보자.

일반적으로 원자엔 핵과 전자인데 초기엔 원자는 단 순히 전리되고 모든 전자는 안정상태를 유지하고 있다. 그러나 최종상태에서는 원자는 이중으로 전리되고 방출전자는  $V_0, X_p, Y_q$  만큼의 운동 에너지를 갖고 자유전자가 된다. 중성원자의 에너지를  $E_0$  이라 가정하면 V 각에서 전리된 원자의 에너지는  $-E_0 + V_0$  이고  $X_p$  와  $Y_q$  각에서 전리된 원자의 에너지는  $-E_0 + Y_q (X_p) + X_p$  가 된다. 여기서  $V_0$  와  $X_p$  는 중성원자의  $V_0$  와  $X_p$  궤도의 결합 에너지 이다. 그래서 에너지 보존법칙에 의하면

$$-E_0 + V_0 = -E_0 X_p + Y_q (X_p) + V_0 X_p Y_q$$

가 된다. 상기 식으로 에너지를 측정하기 위하여 Satellites의 많은 분이 연구하였으나  $V_0, X_p, Y_q$  를 계산치 못하여 실패하고 Bergström 과 Hill이 원자번호로서 Binding Energy의 증가로 실질적인 증

가량  $\Delta Z$ 를 정의하였다. 즉

$$\Delta Z = \frac{L_q (L_p) - (L_p)_s}{(L_p)_s - 1 - (L_q)_s}$$

여기서 Hill은 Hg에 대하여  $L_I$  와  $L_{II}$  각에 대하여  $\Delta z = 0.55$   $L_I$  에 대하여  $\Delta z = 0.76$  임을 찾아 에너지 측정이 가능하게 됐다. 또한 Auger yield의 강도를 측정하기 위하여 k각의 형광과 Auger 수율을 계산하였는데 이는

$$\omega_k = \frac{X_k}{V_k} = \frac{X_k}{A_k + X_k} \quad (\text{형광수율})$$

$$a_k = \frac{A_k}{A_k + X_k} \quad (\text{Auger 수율})$$

$$a_k + \omega_k = 1$$

였다. 그후 Wentzel이 이를 계산하였는데 이는

$$a_k(z) = \frac{C_1}{C_1 + Z^4 C_2} = \frac{1}{1 + bz^4}$$

$$\omega_k(z) = \frac{C_2 Z^4}{C_1 + C_2 Z^4} = \frac{1}{aZ^{-4} + 1}$$

로 계산하고 이에 대한 많은 방법론을 제시하였는데 그 결과 그는 Auger가 발생할 확률  $P(a)$ 를 구하였다. 즉

$$Pa = 1 - P(f) = 1 - Z^4 / (Z^4 + 33^4)$$

이렇게 하여 Auger 수율이 계산됨으로서 많은 사람들이 광전수율에 손을 대기 시작하여 왔다. 특히 1965년 W.T.Ogier와 Darwin은 확실히 여기에 대한 계산을 시도하였는데 광전수율을 M.A.Rumsh가 한바와 동일한 방법으로 물체내에서 지수 함수적으로 감소된다는 가정하에 다음과 같은 식으로서 풀었다. 즉

$$d^2 ni = N_0 f_i(\beta) g_i \mu \sec \theta e^{-\mu x \sec \theta} dx d\Omega$$

여기의  $f_i(\beta)$ 는 광전수율에 대한 각분포함수이고,  $g_i$ 는 선폭수 계수이다. 본인은 여기에 대하여 각각 primary electron과 Auger electron과 Secondary electron에 대하여 수율을 계산하여 보았다.

## III. 光電收率 計算

Soft X-ray로 인한 물질과의 상호작용은 primary photo-electron, Auger electron과 Secondary electron (이를 Knock-on electron 혹은 Delta ray라고도 함) 등의 3가지 전자로 인하여 광전자 방출에 기인한다.

本論文에서는 광전효과의 결과 물질에서 방출되는 전자의 수와 초기광자의 비를 광전수율(photo - electric yield)이라고 하고 이 수율을 아래와 같이 주어진 가정으로 모델을 설정하여 그 설정된 모델로서 광전수율을 계산하여 보고자 한다.

총 광전수율은 이차전자와 Auger 전자, 초기광전자로부터 얻어진다. 다음은 이 모델을 얻기위한 가정이다.

1) 전자는 광자의 흡수물질(밀도가 균일함)로부터 초기전자와 Auger 선원 밀도가  $\phi \mu_{\nu_0} / \cos \alpha$  로서 생성된다.

$\phi$ ; 광자속  $\mu_{\nu_0}$ ; 광전자의 선흡수 계수

2) 전자는 생성된 곳에서 이상적으로 침투(Transfer) 된다.

3) 전자는 정확히 직선적으로 전방평균 비정을 비행한다. (전자의 에너지는 초기광자에너지 ( $h\nu$ )와원자의 결합에너지 함수로 표시된다.)

4) 전자는 실효저지능에 따라서 연속적으로 에너지를 잃는다.

첫번째 가정, 즉 전자원이 일정하다는 것은 광자속은 전자의 비정내에서는 절대로 감소되지 않고 대개 아주 미약한 차를 제외하고는 균질한 물질표면의 전자비정내에서 전자가 방출된다는 것이다.

두번째 가정, 즉 전자가 물질표면에 처음 충돌한 지점부터 이상적으로 침투된다는 것은 전자의 다중산란으로 인한 불규칙성 때문에 각 분포나 방출스펙트럼 분포를 측정하는데 합당한 가정이다.

세번째 가정 즉 전자가 정확히 전방평균 비정을 비행한다는 것은 측정된 수율이 관측된 광전수율과 잘 일치하고 또한 일반적 해석에 상당히 잘 부합된다는 관점의엔 석연치 않은 가정이다.

마지막으로 전자는 실효저지능에 따라 연속적으로 에너지를 잃는다는것 또한 관측된 광전 스펙트럼과 측정된 (계산된) 스펙트럼의 결과와 이러한 가정을 설정함으로써 잘 부합되고 또한 3번째 가정과 양립할 수 있다는 점에서 설정한 것이다.

또한 지금까지 발표된 논문에 의하면 전방 평균 비정은 연속감쇄 비정의 반정도이며 실효저지능은 일반 저지능의 배정도임이 이미 밝혀져 있어 본 계산에 응용한다.

오른편 그림 1에서 보는 바와같이 초기전자가 단위체적(깊이  $r$ , 각  $\theta$ )에서 방출하는 광전수율  $Y_i$ 는

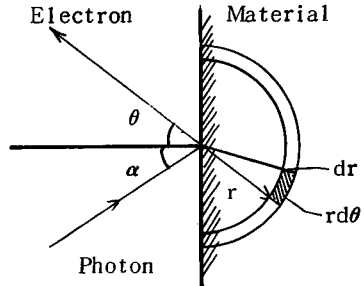


그림 1. 광전수율모델

$$\frac{dY_i}{dv} = \frac{\mu_i(h\nu) \cos \theta}{\cos \alpha \cdot 4\pi r^2} \dots \dots \dots (1)$$

이며

여기서  $r$ 는 전자가 발생한 깊이이고  $\theta$ 는 물질표면과 전자가 방출된 경로와의 각이며  $\alpha$ 는 물질표면에 광자가 입사한 각이다.

$h\nu$ 는 초기광자 에너지이며  $\mu_i(h\nu)$ 는  $i$ 번째 전자각과 광자  $h\nu$ 와의 상호작용에 의한 선흡수계수이다. 그리고  $dv = 2\pi r^2 \sin \theta \cdot d\theta dr$  이므로 우리는 수율을 표현할 수 있다. 즉

$$\frac{d^2 y_i}{dr d\theta} = \frac{\mu_i(h\nu) \cos \theta \sin \theta}{2 \cos \alpha} \dots \dots \dots (2)$$

또한 실효전자저지능  $\frac{dE}{dr}$  로서 전자방출 에너지와 방출전자 각 분포를 표현할 수 있다. 즉

$$\frac{d^2 y_i}{dE d\theta} = \frac{d^2 y_i}{dx d\theta} \left(\frac{dE}{dr}\right)^{-1} = \frac{\mu_i(h\nu) \cos \theta \sin \theta}{2 \cos \alpha} \left(\frac{dE}{dr}\right)^{-1} \dots \dots \dots (3)$$

이는  $0 < E < h\nu - E_i$  영역이며  $E_i$ 는  $i$ 번째 전자각의 결합 에너지이다.

우리는 초기 전자에너지 스펙트럼의 결과 식(3)을 그에 대하여 적분하면

$$\frac{dy_i}{dE} = \frac{\mu_i(h\nu)}{4 \cos \alpha} \left(\frac{dE}{dr}\right)^{-1} \dots \dots \dots (4)$$

또한  $i$ 번째 전자각으로부터 초기전자수율(primary electron yield)의 결과는 상기식을 전자에너지에 대하여 적분하면

$$y_i(h\nu) = \int_0^{h\nu - E_i} \frac{dy_i}{dE} dE = \mu_i(h\nu) \bar{R}(h\nu - E_i) / 4 \cos \alpha \dots \dots (5)$$

여기서  $\bar{R}$ 는 초기에너지 ( $h\nu - E_i$ )의 함수로 된 전방을 향하는 전자의 평균비정이다.

이번에 Auger electron에 대한 수율을 계산하여 보자.

Auger electron은 외자의 전자가 내자으로 떨어질 때 그 에너지 차이가 외자의 전자에게 전도되어 일어나는 현상이다.

K단 에너지에 대한 Auger 전자 방출의 주성분은 K자의 여기로 인하여 L자의 전자가  $E_K - 2E_L$ 의 운동 에너지를 받는다.

여기의  $E_K$ 는 K자의 에너지이고  $E_L$ 는 L자의 에너지이다. K자의 붕괴결과 형광의 확률  $p(f)$ 는

$$p(f) = Z^4 / (Z^4 + 33^4) \dots\dots\dots(6)$$

여기의 Z는 원자번호이다. 그러므로 자연적인 전리확률  $p(a)$ 는

$$p(a) = 1 - p(f) = 1 - Z^4 / (Z^4 + 33^4) \dots\dots\dots(7)$$

이 된다.

그러므로 광전수율( $Y_a$ )의 k자 Auger의 전리성분은

$$\frac{d^2 Y_a(h\nu)}{dE d\theta} = \frac{\mu_K(h\nu) \cos\theta \sin\theta}{2 \cos\alpha} p(a) \left(\frac{dE}{d\tau}\right)^{-1} \dots\dots\dots(8)$$

여기서 에너지 영역은  $0 < E < E_K - 2E_L$ 이다. 즉, L자에서 K자으로의 Auger 현상이 가능하기 때문이다. 그러므로 K자 Auger 스펙트럼  $dY_a/dE$ 는

$$\frac{dY_a}{dE} = \frac{\mu_K(h\nu) p(a)}{4 \cos\alpha} \left(\frac{dE}{d\tau}\right)^{-1} \dots\dots\dots(9)$$

그래서 k자 Auger 수율은

$$Y_a(h\nu) = [\mu_K(h\nu) p(a) / 4 \cos\alpha] \bar{R}(E_K - 2E_L) \dots\dots\dots(10)$$

마지막으로 광전수율의 2차전자 방출성분은 원자 전자와 Auger 전자와의 충돌이나 원자전자와 초기광자와의 충돌의 결과 발생된다.

이차 전자원은 고에너지의 전자束에 비례하므로 만일  $d^2 n_s / dE_s dE_p$ 가 2차 전자원이라면

$$\frac{d^2 n_s}{dE_s dE_p} = \phi_p(E_p) p(E_s, E_p) \dots\dots(11)$$

여기의  $\phi_p(E_p)$ 는 에너지  $E_p$ 를 가진 초기전자 속의 수이다.

또한  $p(E_s, E_p)$ 는 에너지  $E_s$ 를 가진 2차전자와 초기전자 에너지  $E_p$ 와의 단위에너지 단위투과율당의 발생확률이다.

물질 표면에서의 계수속은 등방성속의 반이며 그 수

율은 등방성속의  $\frac{1}{2}$ 이다. 그러므로

$$\phi_p(E_p) = 2Y_p(E_p) \dots\dots\dots(12)$$

또한  $p(E_s, E_p)$ 는 Moller Cross Section으로 계산할 수 있다. 그러므로 2차전자 수율  $Y_s$ 는

$$Y_s = \frac{1}{2} \int_0^{h\nu/2} \int_0^{h\nu} 2Y_p(E_p) p(E_s, E_p) dE_p dE_s \dots\dots\dots(13)$$

고단위 2차전자 수율이나 Auger 전자수율도 상기에서 분석과 비슷하게 풀 수 있다.

상기 3가지의 결과 총 광전수율은 3가지의 합으로 계산할 수 있다. 즉

$$Y(h\nu) = \sum_i \mu_i(h\nu) \bar{R}(h\nu - E_i) / 4 \cos\alpha + [\mu_K(h\nu) p(a) / 4 \cos\alpha] \bar{R}(E_K - 2E_L) + \frac{1}{2} \int_0^{h\nu/2} \int_0^{h\nu} 2Y_p(E_p) p(E_s, E_p) dE_p dE_s \bar{R}(E_s) dE_s \dots\dots\dots(14)$$

로 표현된다. 그러므로,

$$Y(h\nu) = \sum_i Y_i + Y_a + Y_s \dots\dots\dots(15)$$

앞서 계산된 (15)식에 M. A. Rumsh가 측정 한 실험치와 비교하여 보면 다음과 같다.

Target	$\mu$ ( $cm^2/g$ )	비정 ( $\mu g/cm^2$ )	계산된수율 (%)	관측된수율 (%)
Al	49	190	0.7	0.3
Cr (K)	275	22	1.1	1
(L)		300		
Sn (L)	247	70	2.3	2.4
(M)		200		

#### IV. 結 論

상기 이론식에서 본 바와같이 광전수율의 계산결과 얻어진 결론은 다음과 같다.

1) 방출전자(단위각당)의 각 분포는 모든 전자 에너지에 대하여  $\sin\theta \cos\theta$ 에 비례한다. <어떠한 방출전자에서도 관련성이 없음>

2) 광전수율의 Energy Spectrum의 모양은 각에 대하여 독립적이다.

3) 얇은 Target에 대하여는 전방과 후방의 광전수율이 거의 같다.

이상의 4 가지 결론을 얻고 앞에서 계산된 식에 일반 값을 대입하여 계산된 수율은 관측치와 일반적으로 잘 맞고 있다는 것을 보여준다.

V. Appendix

—입자의 초기 광자속에 대한 광전방출 전류계산—

어떤 물질 표면에 입자의 초기광자속이 주어졌다고 하면 방출전류는 광전수율로서 표현할 수 있다. 여기서  $\phi(h\nu, t, \alpha)$  를 각각 단위에너지, 단위시간, 단위각당의 광자의 수라하고 전자방출전류  $[J(E, t, \theta)]$  를 단위에너지, 단위시간, 단위각당으로 표현하면 이것은

$$J(E, t, \theta) = \int_{h\nu} \int_{\alpha} \phi(h\nu, t, \alpha) \cos \alpha \frac{d^2Y}{dEd\theta} d(h\nu) d\alpha \dots\dots\dots(1)$$

윗식에서 Y는 총수율이다. 여기서의 방출각은 어떠한 경우나 독립적이므로

$$J(E, t, \theta) = J(E, t) p(\theta) \dots\dots\dots(2)$$

여기서  $p(\theta) = 2 \sin \theta \cos \theta$

$\theta$ 에 대하여 적분하면

$$J(E, t) = \int_{h\nu} \int_{\alpha} \phi(h\nu, t, \alpha) \cos \alpha \left( \frac{dY}{dE} \right) d(h\nu) d\alpha \dots\dots\dots(3)$$

초기 전자방출 전류와 Auger 전자성분은 다음과 같이 표현할 수 있다.

$$\frac{dY}{dE} = \sum_i \frac{dY_i}{dE} + \frac{dY_a}{dE} \dots\dots\dots(4)$$

이들 각항은  $1/\cos \alpha$ 에 비례하고 또한 방출전류는 초기광자류의 각에 독립적이라면

$$\phi(h\nu, t) = \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} \phi(h\nu, t, \alpha) d\alpha \dots\dots\dots(5)$$

그러므로 초기와 Auger 방출전류는

$$J(E, t) = \left( \frac{dE}{dr} \right)^{-1} \left\{ \int_{h\nu = E + E_K}^{\infty} \phi(h\nu, t) \frac{\mu_K(h\nu) dh\nu}{4} + \int_{h\nu = E + E_L}^{\infty} \phi(h\nu, t) \frac{\mu_L(h\nu) dh\nu}{4} + H(E_K - 2E_L - E) \right\} \times p(a) \int_{h\nu = E_K}^{\infty} \phi(h\nu, t) \frac{\mu_K(h\nu) dh\nu}{4} \dots\dots\dots(6)$$

(전자/단위면적, 단위에너지, 단위시간)

여기서  $H(x)$ 는 Unit Step function이며  $x \geq 0$ 일때  $H(x) = 1$ 이며  $x < 0$ 일때  $H(x) = 0$ 이다.

參 考 文 獻

1. W.T. Ogier and D.V. Ellis: J. Appl. Phys. 36, 3788, 1965 .
2. H.H. Seliger: Phys. Rev. 100, 1029, 1955 .
3. Rohrllich and B.C. Carlson: Phys. Rev. 93, 38, 1954 .
4. I.M. Izraileve: Z.. Tekh. Fiz. 32, 1382, 1962 .
5. A.S. Ganeev and I.M. Izrailev: Zh. Tekh Fiz. 31, 376, 1961 .
6. E.A. Burke: IEEE Trans. Nuc. Sci. NS 22, 6, 2543, 1975 .
7. H.J. Fitting: Phys. Stat. Sol. (a) 26, 525, 1974 .
8. E.H. Darlington, J. Phys. D: Appl. Phys. 8, 85, 1975 .
9. R.R. Schaefer: J. Appl. Phys. 44, 152, 1973 .
10. W.T. Ogier and D.V. Ellis: J. Appl. Phys. 36, 3788, 1965 .
11. J.B. Fisk: Phys. Rev. 49, 167, 1936
12. J.N. Bradford: IEEE Trans. Nuc. Sci, 6, 105, 1973 .
13. E.J. McGuier: Phys. Rev. 185, 1 1969 .
14. D.L. Walters and C.P. Bhalla: Phys. Rev. A., 4, 2164 1971 .
15. B.L. Henke: Advances in X-Ray analysis, Plenum Press, Inc., New York, 1962 Vol. 5 P. 295.