

УДК 539.1

## ПАРАМЕТРИЗАЦИЯ СЕЧЕНИЯ ФОТОПОГЛОЩЕНИЯ В МЯГКОЙ ОБЛАСТИ СПЕКТРА

В. М. Гришин, А. П. Костин, С. К. Котельников, Д. Г. Стреблеченко

*Коэффициенты полиномиальной аппроксимации сечения фотопоглощения ряда газов в мягкой области спектра приведены в соответствие с экспериментальными данными. Расчеты удельной первичной ионизации в инертных газах, полученные на основе поправленных значений сечения фотопоглощения, лучше согласуются с измерениями.*

Сечения фотопоглощения находят все большее применение в современной науке и технике. Существующие таблицы сечений фотопоглощения  $\sigma_\gamma(\omega)$  элементов с атомными номерами  $Z$  в диапазоне 1 – 100 ограничены, как правило, областью энергий  $\omega > 100 \text{ эВ}$  [1, 2]. Однако для многочисленных приложений необходимо знание сечений фотопоглощения вблизи первого потенциала ионизации  $I_1 \sim 10 \text{ эВ}$ . Недавно появились таблицы [3], в которых сделана попытка представить сечения фотопоглощения элементов с  $Z = 1 - 100$  в области энергий  $\omega > 10 \text{ эВ}$  в виде полинома обратных степеней  $\omega$ :

$$\sigma_\gamma(\omega) = \sum_{k=1}^4 a_k^{(i)} \omega^{-k}, \quad (1)$$

где коэффициенты  $a_k^{(i)}$  подбираются отдельно для каждого  $i$ -го интервала энергии (границы интервалов как правило совпадают с пиками фотопоглощения соответствующего атома). Применение данных [3] для расчетов ионизационных эффектов в газовых детекторах показало, что они не согласуются с измерениями удельной первичной ионизации и распределений ионизационных потерь энергии. В настоящей работе коэффициенты  $a_k^{(i)}$  для ряда газов в мягкой области спектра  $\omega \geq 10 \text{ эВ}$  приведены в соответствие с экспериментальными данными, полученными с помощью синхротронного излучения.

Результаты проиллюстрированы на примере расчета удельной первичной ионизации инертных газов.

Процедура подгонки коэффициентов  $a_k^{(i)}$  по экспериментальным и табличным данным осуществлялась методом наименьших квадратов. Для водорода, фтора, углерода, азота и кислорода производилось сравнение с данными, полученными в экспериментах с синхротронным излучением для молекулярных газов  $N_2$ ,  $O_2$ ,  $CO_2$ ,  $CH_4$  и  $CF_4$  в диапазоне длин волн 175–770 Å [4, 5]. Для инертных газов производилось сравнение с экспериментальными данными, приведенными в таблицах [6, 7].

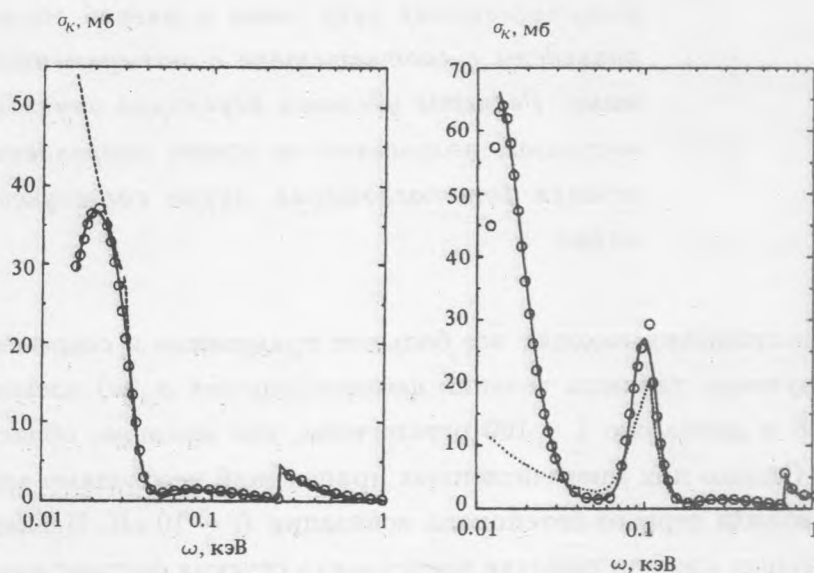


Рис. 1. Зависимость сечения фотопоглощения аргона  $\sigma_\gamma$  от энергии  $\omega$  в области  $10-10^3$  эВ. Штриховая линия – [3], сплошная – [6], точки – настоящая работа.

Рис. 2. Зависимость сечения фотопоглощения ксенона  $\sigma_\gamma$  от энергии  $\omega$  в области  $10-10^3$  эВ. Штриховая линия – [3], сплошная – [7], точки – настоящая работа.

На рис. 1, 2 приведены графики зависимости сечения фотопоглощения от энергии для аргона и ксенона. В мягкой области спектра  $\omega \leq 300$  эВ данные [3] и [6, 7] сильно различаются. В таблице 1 приведены значения коэффициентов  $a_k^{(i)}$  (в единицах  $cm^2/e(keV)^k$ ) в мягкой области спектра, согласующиеся с данными [4–7], для элементов, которые входят в состав рабочих смесей газовых детекторов. Коэффициенты, отвечающие более жесткой части спектра  $\omega \geq 300$  эВ, практически совпадают с данными, приведенными в [3].

Т а б л и ц а 1

Коэффициенты полиномиальной аппроксимации сечения  
фотопоглощения в мягкой области спектра

| i        | Левая<br>граница<br>интервала | $a_1^{(i)}$ | $a_2^{(i)}$ | $a_3^{(i)}$ | $a_4^{(i)}$ |
|----------|-------------------------------|-------------|-------------|-------------|-------------|
| Водород  |                               |             |             |             |             |
| 1        | 0,01                          | 0           | 0           | 0           | 0           |
| 2        | 0,0136                        | -1,231E+06  | 5,900E+04   | -8,407E+02  | 3,742E+00   |
| 3        | 0,02                          | -1,131E+04  | -3,682E+02  | 9,516E+01*  | -1,075E+00  |
| Гелий    |                               |             |             |             |             |
| 1        | 0,01                          | -2,997E+03  | 1,050E+03   | -8,333E+00  | 3,107E-02   |
| 2        | 0,15                          | 1,857E+01   | -4,079E+01  | 8,609E+01   | -2,618E+00  |
| 3        | 0,8                           | 1,606E+00   | -1,726E+01  | 8,101E+01   | -4,928E+00  |
| Углерод  |                               |             |             |             |             |
| 1        | 0,01                          | 0           | 0           | 0           | 0           |
| 2        | 0,0136                        | 1,390E+05   | -5,808E+03  | 8,269E+01   | -3,935E-01  |
| 3        | 0,02                          | -3,829E+04  | 3,768E+03   | -9,082E+01  | 6,775E-01   |
| Азот     |                               |             |             |             |             |
| 1        | 0,01                          | 1,010E+04   | 0           | 0           | 0           |
| 2        | 0,0404                        | -3,622E+02  | 3,873E+02   | 1,244E+01   | -4,452E-01  |
| 3        | 0,4016                        | -2,338E+03  | 5,732E+03   | -2082E+02   | 1,482E+02   |
| Кислород |                               |             |             |             |             |
| 1        | 0,01                          | 9,343E+03   | 9,026E+02   | -2,467E+01  | 1,505E-01   |
| 2        | 0,02                          | 6,034E+03   | 7,319E+02   | -2,677E+01  | 2,842E-01   |
| 3        | 0,0483                        | -2,863E+02  | 4,085E+02   | 4,436E+01   | -1,782E+00  |
| Фтор     |                               |             |             |             |             |
| 1        | 0,01                          | 1,129E+04   | 0           | 0           | 0           |
| 2        | 0,0724                        | -2,676E+02  | 4,767E+02   | 8,767E+01   | -4,504E+00  |
| 3        | 0,687                         | -8,907E+01  | 6,850E+02   | 7,217E+03   | -2,022E+03  |

## Неон

|   |       |            |            |            |            |
|---|-------|------------|------------|------------|------------|
| 1 | 0,01  | 1,553E+04  | -1,011E+02 | -5,441E+00 | 4,873E-02  |
| 2 | 0,045 | 9,347E+02  | 2,197E+03  | -1,282E+02 | 2,253E+00  |
| 3 | 0,124 | -1,940E+02 | 4,340E+02  | 2,357E+02  | -1,666E+01 |

## Кремний

|   |        |            |           |            |            |
|---|--------|------------|-----------|------------|------------|
| 1 | 0,01   | 4,575E+02  | 0         | 0          | 0          |
| 2 | 0,0305 | -1,168E+02 | 1,269E+02 | -5,506E+00 | 6,616E-02  |
| 3 | 0,099  | -6,451E+02 | 1,836E+03 | 5,350E+02  | -6,436E+01 |

## Аргон

|   |       |            |           |            |            |
|---|-------|------------|-----------|------------|------------|
| 1 | 0,01  | -8,294E+04 | 5,720E+03 | -1,101E+02 | 6,668E-01  |
| 2 | 0,04  | -1,401E+03 | 9,577E+02 | -7,842E+01 | 1,797E+00  |
| 3 | 0,245 | -2,244E+02 | 1,388E+03 | 2,571E+03  | -5,113E+02 |

## Криптон

|   |        |            |            |            |            |
|---|--------|------------|------------|------------|------------|
| 1 | 0,01   | -6,520E+03 | 4,096E+02  | -2,238E+00 | -2,240E-02 |
| 2 | 0,0305 | 2,024E+03  | -2,083E+02 | 4,439E+00  | 1,056E-01  |
| 3 | 0,097  | 7,648E+02  | 5,257E+03  | -9,960E+02 | 4,686E+01  |

## Ксенон

|   |        |            |            |            |            |
|---|--------|------------|------------|------------|------------|
| 1 | 0,01   | 3,405E+03  | -3,311E+02 | 1,048E+01  | -7,987E-02 |
| 2 | 0,065  | -4,118E+04 | 2,024E+04  | -2,136E+03 | 6,490E+01  |
| 3 | 0,1073 | 7,622E+04  | -2,983E+04 | 3,608E+03  | -1,222E+02 |

Поправленные коэффициенты  $a_k^{(i)}$  использовались для расчета удельной первичной ионизации инертных газов под действием релятивистских заряженных частиц. Вычисления проводились в рамках фотоабсорбционной ионизационной (ФАИ) модели [8, 9], причем удельная первичная ионизация  $n_1$  вычислялась по формуле:

$$n_1 = \int_{I_1}^{\omega_{max}} \frac{d\sigma_i}{d\omega} d\omega, \quad (2)$$

где  $d\sigma_i/d\omega$  – дифференциальное сечение неупругих ионизирующих столкновений релятивистской заряженной частицы,  $\omega_{max} \sim 100$  кэВ – максимальное значение передачи энергии в отдельном столкновении (определяется кинематикой столкновения или геометрией детектора). Согласно ФАИ модели для газов  $d\sigma_i/d\omega$  вычислялось по формуле:

$$\frac{d\sigma_i}{d\omega} = \frac{\alpha}{\pi\beta^2} \left\{ \frac{\sigma_\gamma(\omega)}{\omega} \left[ \ln \frac{2mv^2}{\omega |1 - \beta^2\epsilon|} - \frac{\epsilon_1 - \beta^2 |\epsilon|^2}{\epsilon_2} \arg(1 - \beta^2\epsilon^*) \right] + \right.$$

$$\left. + \frac{1}{\omega^2} \int_{I_1}^{\omega} \sigma_{\gamma}(\tilde{\omega}) d\tilde{\omega} \right\}, \quad (3)$$

где  $\alpha$  – постоянная тонкой структуры,  $\beta = v/c$  – скорость частицы  $v$  в единицах скорости света  $c$ ,  $m$  – масса электрона,  $\epsilon = \epsilon_1 + i\epsilon_2$  – диэлектрическая проницаемость вещества. Для газов  $\epsilon_2 \approx N\hbar\sigma_{\gamma}(\omega)/\omega$ , где  $N$  – число атомов в единице объема,  $\hbar$  – постоянная Планка. Значение  $\epsilon_1(\omega)$  вычислялось, следуя дисперсионному соотношению Крамерса – Кронига, причем соотношение (1) позволяет вычислить соответствующий интеграл аналитически в смысле главного значения для всех значений  $\omega$  за исключением пиков фотопоглощения, где сечение фотопоглощения  $\sigma_{\gamma}(\omega)$  претерпевает разрывы. Поскольку интегрирование в (2) ограничено непрерывной областью спектра без учета дискретных линий, значение  $\sigma_{\gamma}(\omega)$  в (3) умножалось на коэффициент

$$\frac{2\pi^2\hbar e^2 Z}{mc} \left[ \int_{I_1}^{\omega_{max}} \sigma_{\gamma}(\omega') d\omega' \right]^{-1},$$

где  $e$  – заряд электрона. Тогда сечение фотопоглощения будет удовлетворять правилу сумм Томаса – Райхе – Куна [8, 10]:

$$\int_0^{\infty} \sigma_{\gamma}(\omega) d\omega = \frac{2\pi^2\hbar e^2 Z}{mc}.$$

Т а б л и ц а 2

Значения удельной первичной ионизации инертных газов

| Элемент | $n_{1min}$ из [3] | настоящая работа | эксперимент [9] |
|---------|-------------------|------------------|-----------------|
| He      | 4,02              | 3,97             | 3,4             |
| Ne      | 11,3              | 10,9             | 11              |
| Ar      | 27,4              | 24,5             | 26              |
| Kr      | 27,4              | 32,1             | 34,3            |
| Xe      | 20,6              | 44,7             | 45,9            |

В таблице 2 приведены значения удельной первичной ионизации инертных газов под действием релятивистской заряженной частицы в области минимума ионизации. Видно, что расчеты на основе исправленных коэффициентов  $a_k^{(i)}$  в мягкой области спектра лучше согласуются с экспериментальными данными [9], особенно для тяжелых газов (Kr, Xe).

Сечения фотопоглощения элементов, входящих в состав распространенных газов, согласующиеся с экспериментальными данными в мягкой ( $\sim 10-300$  эВ) области спектра, могут оказаться полезными для приложений в физике, химии и биологии при расчете атомных характеристик и ионизационных эффектов.

Авторы благодарны И. Л. Гавриленко, обратившему их внимание на работу [3], и С. И. Никольскому за поддержку настоящей работы.

ЛИТЕРАТУРА

[1] Henke B. L. et al., At. Data Nucl. Data Tables, **27**, 1 (1982).  
 [2] Hubbel J. H. et al., At. Data Nucl. Data Tables, **38**, 1 (1988).  
 [3] Biggs F. and Lighthill R., Preprint SAND 87-0070, May 1990.  
 [4] Lee L. C. et al., J. of Quant. Spectr. & Radiative Transfer, **13**, 1023 (1973).  
 [5] Lee L. C. et al., Journ. of Chem. Phys., **67**, 1237 (1977).  
 [6] Marr G. V. and West J. B., Atom. Data Nucl. Data Tables, **18**, 497 (1976).  
 [7] West J. B. and Morton J., Atom. Data Nucl. Data Tables, **30**, 253 (1980).  
 [8] Allison W. W. M. and Cobb J., Ann. Rev. Nucl. Part. Sci., **30**, 253 (1980).  
 [9] Асосков В. С. и др. Труды ФИАН, **140**, 3 (1982).  
 [10] Fano U. and Cooper J. W., Rev. Mod. Phys., **40**, 441 (1968).

Поступила в редакцию 11 мая 1994 г.

| Элемент | Сечение фотопоглощения (см <sup>2</sup> /моль) | Сечение фотопоглощения (см <sup>2</sup> /атом) | Сечение фотопоглощения (см <sup>2</sup> /моль) |
|---------|--|--|--|
| Li      | 1.01   | 0.01   | 1.01   |
| Be      | 0.01   | 0.01   | 0.01   |
| B       | 0.01   | 0.01   | 0.01   |
| C       | 0.01   | 0.01   | 0.01   |
| N       | 0.01   | 0.01   | 0.01   |
| O       | 0.01   | 0.01   | 0.01   |