

Учет разрешения детектора при моделировании вторичных спектров рентгеновского излучения

Е. Д. Холопова¹, А. Ю. Грязнов², Е. И. Рулев

Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет

«ЛЭТИ» им. В.И. Ульянова (Ленина)

¹wkholopova@gmail.com, ²ay-gryaznov@yandex.ru

Аннотация. В работе рассмотрена зависимость разрешения различных детекторов рентгеновского излучения от энергии регистрируемых квантов. Показаны результаты моделирования вторичных спектров и спектров рассеянного излучения, возникающие при облучении объекта с учетом всех характеристик регистрирующего тракта.

Ключевые слова: рентгенофлуоресцентный анализ, разрешение детектора

I. ВВЕДЕНИЕ

В работах [1-3] авторами описаны программные комплексы для моделирования спектра первичного излучения рентгеновской трубки, а также сложного спектра рентгеновского излучения, регистрируемого энергодисперсионным спектрометром в ходе рентгенофлуоресцентного анализа. Во втором случае моделировалось вторичное характеристическое излучение от элементов анализируемого образца, а также попадающее в детектор первичное рассеянное излучение рентгеновской трубки, включающее тормозную и характеристическую составляющие. Пример смоделированного спектра ювелирного золотого сплава представлен на рис. 1.

Представленный рисунок показывает, что в этой версии программы не учитывалось одна из основных характеристик детектора рентгеновского излучения - энергетическое разрешение, обеспечивающее возможность регистрации элементов с близко расположенными линиями характеристического излучения. Описанию модуля, учитывающего эту характеристику, посвящена данная статья.

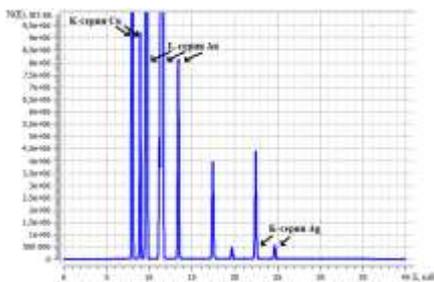


Рис. 1. Спектр ювелирного золотого сплава при напряжении 40 кВ и токе 200 мкА, а также алюминиевом фильтре 50 мкм

II. МАТЕРИАЛЫ И МЕТОДЫ

Как известно, каждая линия характеристического излучения (будь то рассеянное первичное характеристическое излучение трубки или возбужденное в анализируемом образце характеристическое излучение элементов) обладает собственным «уширением»,

обусловленным различными природными факторами. При этом форма линии может быть описана по закону нормального распределения, однако собственная полуширина линий относительно невелика и составляет порядка нескольких электронвольт для элементов середины таблицы Менделеева. С учетом того, что разрешение даже кристалл-дифракционных спектрометров составляет 30–50 эВ и более, а наиболее высокоразрешающих полупроводниковых детекторов – от 100 эВ, собственным уширением линии можно пренебречь.

Разрешение традиционных детекторов рентгеновского излучения (газовых пропорциональных и полупроводниковых) зависит от энергии регистрируемых квантов и может быть представлена спектральными зависимостями, показанными на рис. 2.

«Размыть» линии первичного рассеянного и вторичного флуоресцентного характеристического излучения в этом случае достаточно просто, используя традиционное нормальное распределение, при этом среднеквадратичное отклонение определяется разрешением детектора на данной энергии.

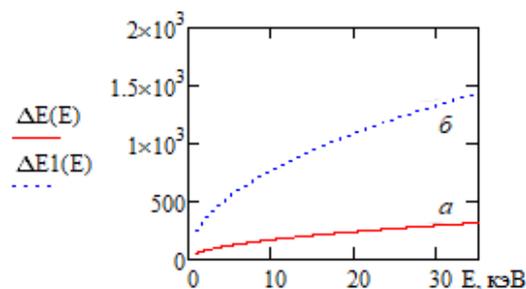


Рис. 2. Спектральная зависимость разрешения детекторов: (а) полупроводникового и (б) газового пропорционального.

$$f(x) = \left(\frac{1}{\sigma_x \sqrt{2\pi}} \right) * \exp \left(-\frac{(x - m_x)^2}{2\sigma_x^2} \right).$$

Например, если для К α -линии железа с энергией 6.4 кэВ разрешение полупроводникового детектора будет составлять 130 эВ, то для К α -линии серебра с энергией 22.1 кэВ – уже 250 эВ.

Существенно большую сложность представляет собой размытие спектра рассеянного тормозного рентгеновского излучения. Если бы спектр имел гладкую зависимость, то специально «размытие» его может было бы и не проводить, однако самопоглощение в мишени трубки, ослабление первичным и вторичным фильтрами, а также самопоглощение в анализируемой пробе может приводить к возникновению скачкообразных изменений спектральной зависимости, обусловленной скачками

коэффициента фотопоглощения перечисленных материалов (рис. 3).

В данном случае необходимо использовать операцию свертки двух функций – спектрального распределения рассеянного тормозного излучения и спектрального распределения энергетического разрешения детектора:

$$f(t) = \int_{-\infty}^{\infty} f_1(\tau) f_2(t-\tau) d\tau.$$

Математически данная операция в нашем случае может быть представлена следующим образом:

$$I(X) = \int_1^{E_{\max}} I_r(E) dnorm(E, X, \Delta E(E)) dE,$$

где E_{\max} – максимальная энергия в спектре, $I_r(E)$ – исходная спектральная интенсивность, $dnorm(E, X, \Delta E(E))$ – функция плотности распределения в каждой точке для данного среднего значения X и стандартного отклонения $\Delta E(E)$.

Данная операция достаточно сильно зависит от задаваемого разрешения детектора и шага, с которым осуществляется расчет итогового спектра (если вводимое разрешение детектора будет равно или меньше шага для расчета, то на спектре возникнет большое количество артефактов).

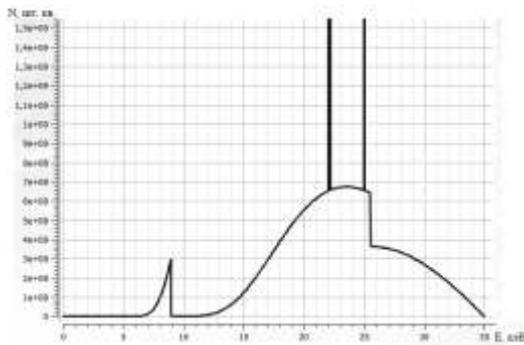


Рис. 3. Пример влияния коэффициентов фотопоглощения на спектр первичного излучения

III. РЕЗУЛЬТАТЫ

Примером реализации данного модуля может служить представленные на рис. 4 и рис. 5 спектры жаропрочной стали, состоящий из 70 % железа, 18 % никеля, 10 % кобальта и 2 % остальных примесей.

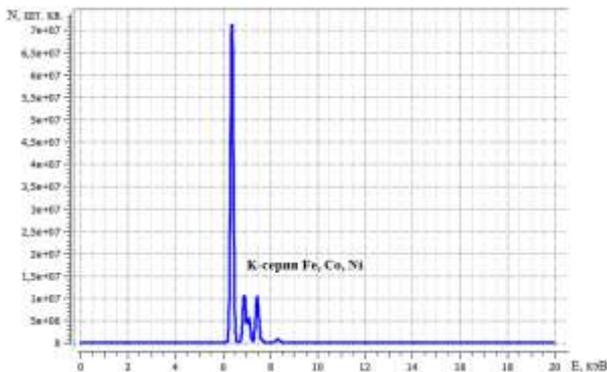


Рис. 4. Спектр жаропрочной стали при разрешении 130 эВ (ППД)

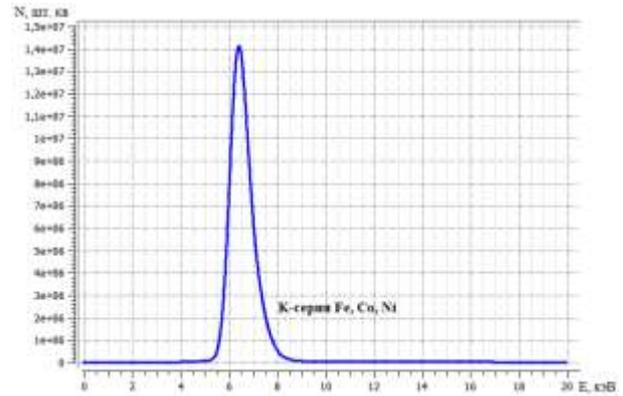


Рис. 5. Спектр жаропрочной стали при разрешении 800 эВ (ГПД)

IV. ВЫВОДЫ

Описанный модуль дает возможность рассчитывать вторичные спектры и спектры рассеянного излучения, возникающие при облучении объекта с учетом всех характеристик регистрирующего тракта (такие параметры, как чувствительность детектора, эффективность и площадь входного окна учитывались ранее). Использование разработанной программы позволяет как определять оптимальные режимы работы спектрометра, так и предварительно оценивать возможности решения на нем той или иной аналитической задачи по определению химического состава вещества.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] Свид. о регистр. прогр. для ЭВМ. № 2014618547. / Холопова Е.Д., Бессонов В.Б., Грязнов А.Ю., Жамова К.К., Лившиц А.О., Кунашик Е.С. Программа для моделирования спектров излучения «Спектрон»; Оpubл. 20.09.2014.
- [2] Программный комплекс для моделирования вторичных спектров рентгеновского излучения / Холопова Е.Д., Грязнов А.Ю., Староверов Н.Е., Александрова А.А., Чебыкин А.П., Бавкунова И.Ю. // VIII Всероссийская научно-практическая конференция производителей рентгеновской техники. Программа и материалы конференции, Санкт-Петербург, 25-26 нояб. 2021. СПб.: Изд-во СПбГЭТУ «ЛЭТИ», 2021. С. 131-135
- [3] Свид. о регистр. прогр. для ЭВМ. № 2021680309. / Грязнов А.Ю., Холопова Е.Д., Староверов Н.Е., Александрова А.А., Баранов И.М. Программный комплекс для моделирования вторичных спектров рентгеновского излучения (XRF-spectr). Оpubл. 09.12.2021.