

УДК 543.422

## РАСЧЕТ ТОРМОЗНОГО СПЕКТРА ЭЛЕКТРОНОВ ОТДАЧИ, ВОЗНИКАЮЩЕГО ПРИ ВОЗБУЖДЕНИИ РЕНТГЕНОВСКОЙ ФЛУОРЕСЦЕНЦИИ ИЗЛУЧЕНИЕМ РАДИОИЗОТОПНЫХ ИСТОЧНИКОВ

А.Ю.Портной, Г.В.Павлинский, А.Ю.Духанин\*, П.Зузаан\*\*, Б.Эрдемчимег\*\*  
Институт прикладной физики при Иркутском государственном университете

664003, Иркутск, бул.Гагарина, 20.

\* Иркутский государственный медицинский университет.

\*\* Монгольский государственный университет.

portnoy@isem sei.irk.ru

Поступила в редакцию 30 сентября 2002 г.

Предложены теоретические выражения, определяющие зависимость спектрального распределения тормозного излучения электронов отдачи (Комптоновских электронов) от элементного состава флуоресцирующего материала. Рассмотрен случай монохроматического первичного излучения радиоактивных источников  $^{241}\text{Am}$  и  $^{109}\text{Cd}$ . Выполнен расчет рассматриваемого распределения для некоторых элементов.

Портной Александр Юрьевич - аспирант Иркутского государственного университета.

Область научных интересов: взаимодействие излучения с веществом.

Автор 10 опубликованных работ.

Павлинский Гелий Вениаминович - доктор физико-математических наук, НИИ прикладной физики Иркутского государственного университета.

Область научных интересов: взаимодействие излучения с веществом, рентгено-спектральный анализ.

Автор 160 опубликованных работ.

Духанин Алексей Юрьевич - старший преподаватель Иркутского государственного медицинского университета.

Область научных интересов - взаимодей-

ствие рентгеновского излучения с веществом.

Автор 10 опубликованных работ.

Зузаан Пурэв - кандидат физико-математических наук, заместитель директора центра ядерных исследований Монгольского государственного университета, Монголия.

Область научных интересов: рентгенофлуоресцентный анализ.

Автор 120 опубликованных работ.

Эрдемчимег Батчуулун - научный сотрудник Монгольского государственного университета, Монголия.

Область научных интересов: рентгеновский анализ.

Автор более 10 опубликованных работ.

### Введение

Знание составляющих фона и их зависимости от условий возбуждения рентгеновской флуоресценции необходимо для выбора оптимальных режимов работы аппаратуры с целью обеспечения максимальной контрастности аналитического сигнала в рентгенофлуоресцентном анализе (РФА).

Физические процессы, приводящие к возникновению фонового излучения при возбуждении образца монохроматическим источником, нельзя

считать полностью изученными. Если понимать под фоном непрерывное излучение в области аналитических линий характеристического спектра, возникающее в облучаемом образце и на деталях аппаратуры, то к настоящему времени рассмотрены только:

- однократно и многократно рассеянное образом излучение [1 - 5];

- тормозное излучение фото- и Оже - электронов, возникающих в облучаемом материале [6].

Другие ранее рассмотренные составляющие рентгеновского фона связаны с прохождением рентгеновского излучения через систему выделения и регистрации аналитического сигнала [5. 7-11]. Они не связаны с фоновым излучением флуоресцирующего образца и, в принципе, могут быть устранены путем совершенствования аппаратуры.

Среди рассмотренных в настоящее время процессов формирования фона рентгеновского флуоресцентного излучения обойден вниманием процесс торможения электронов отдачи, возникающих при комптоновском рассеянии. В работе [3] лишь упоминается об этом возможном источнике фона, однако сколько-нибудь полного рассмотрения указанного процесса нами в литературных источниках не обнаружено. Между тем при Комптоновском рассеянии фотона с энергией 60 кэВ (радиоизотоп  $^{241}\text{Am}$ ) на свободном электроне энергия электронов отдачи достигает 11.5 кэВ, то есть их тормозное излучение появляется в области К-серии характеристических линий элементов с атомными номерами  $Z < 32$ .

Целью данной работы является теоретическое рассмотрение процесса формирования рентгеновского фона, обусловленного возникновением в облучаемом образце непрерывного тормозного спектра электронов отдачи.

### Теория

Возникновение тормозного фотона при комптоновском рассеянии первичного фотона происходит по следующей схеме: первичный фотон  $\rightarrow$  электрон отдачи (комптоновское взаимодействие)  $\rightarrow$  фотон тормозного излучения.

Для упрощения расчетов зададимся следующими ограничениями:

- образец будем считать массивным и однородным;
- поскольку длина свободного пробега электрона в веществе много меньше длины свободного пробега рентгеновского фотона, то процесс генерации тормозного излучения примем происходящим в точке комптоновского взаимодействия;
- вследствие того что направление движения электрона отдачи очень быстро приобретает произвольное направление, поток электронов будем считать изотропным.

С использованием этих допущений для спектральной интенсивности  $dN_c(E)$  тормозного излучения электронов отдачи с энергией  $E$  (на интервал энергии  $dE$ ), приходящейся на один фотон первичного монохроматического излучения с энергией  $E_0$ , можно написать следующее выражение:

$$\frac{dN_c(E)}{dE} = \frac{\text{Const}}{\mu(E_0) + \mu(E)} \cdot \frac{\sin(\varphi)}{\sin(\psi)} \int_0^{E_{cmax}} P_{E_0 \rightarrow E_e} \cdot P_{E_e \rightarrow E} \cdot dE_e \quad (1)$$

где  $P_{E_0 \rightarrow E_e}$  - вероятность возникновения при комптоновском взаимодействии электрона отдачи с энергией  $E_e$ ;  $P_{E_e \rightarrow E}$  - вероятность того, что электрон отдачи с энергией  $E_e$  при торможении даст фотон с энергией  $E$ . Интеграл берется по всей области энергий возникающих электронов отдачи  $E_e$ . При энергии электронов  $E_e$  меньше энергии фотона  $E$  эту вероятность считаем равной нулю;  $\mu(E_0)$  и  $\mu(E)$  - массовые коэффициенты поглощения первичного и тормозного излучения соответственно,  $\varphi$  и  $\psi$  - углы падения первичного и выхода тормозного излучения соответственно; Const - константа, определяемая геометрией спектрометра и некоторыми фундаментальными параметрами, не зависящими от энергии электронов и фотонов первичного и тормозного излучения.

Рассмотрим процесс образования потока электронов отдачи в образце и их энергетический спектр. Вероятность комптоновского взаимодействия фотона с электроном атома определяется [11] следующим дифференциальным сечением рассеяния:

$$\frac{d\sigma_{am}}{d\Omega} = \frac{d\sigma_{KNT}}{d\Omega} \cdot F_{nk} \quad (2)$$

где  $F_{nk}$  - атомный фактор некогерентного взаимодействия;  $\Omega$  - телесный угол комптоновского рассеяния:

$$\frac{d\sigma_{KNT}}{d\Omega} = \left( \frac{r_0^2}{2} \right) \cdot \left( \frac{E_s}{E_0} \right)^2 \cdot \left( \frac{E_0}{E_s} + \frac{E_s}{E_0} - \sin^2(\Theta) \right) \quad (3)$$

- дифференциальное сечение рассеяния Клейна-Нишины-Тамма;  $r_0$  - классический радиус электрона;  $\Theta$  - угол рассеяния при комптоновском взаимодействии.

Фактор некогерентного рассеяния  $F_{nk}$  может быть рассчитан [12] по формуле

$$F_{nk} = Z \cdot (1 - e^{-5w})$$

$$\text{где } w = \frac{2.21}{Z^{0.66}} \cdot \frac{\sin(\frac{\Theta}{2})}{\lambda} \quad ; \quad Z - \text{атомный номер рассеивающего элемента.}$$

Предположим, что комптоновское рассеяние происходит на внешних слабо связанных электронах атома. Тогда энергию электрона отдачи, после комптоновского взаимодействия, считаем равной

$$E_e = E_0 - E_s = E_0 \frac{k(1 - \cos(\Theta))}{1 + k(1 - \cos(\Theta))} \quad (4)$$

$$\text{где } k = \frac{\hbar \cdot v_0}{m_0 \cdot c^2} = \frac{E_0}{511,003}$$

Энергетическое распределение количества электронов по энергии

$$\frac{dN_e}{dE_e} = \frac{d\sigma_{am}}{d\Theta} \cdot \frac{1}{dE_e} = \frac{d\sigma_{KNT} \cdot F_{nk}}{d\Omega} \cdot \frac{2 \cdot \pi \cdot \sin(\Theta)}{dE_e}$$

Таким образом, вероятность преобразования первичного фотона в комптоновский электрон с энергией  $E_e$  определяется выражением

$$P_{E_0 \rightarrow E_e} = \frac{dN_e}{dE_e} = \frac{d\sigma_{KNT} \cdot F_{nk}}{d\Omega} \cdot \frac{2 \cdot \pi}{E_0 \cdot k} \cdot \frac{1}{\left( \frac{1}{1+k \cdot (1-\cos(\Theta))} - \frac{k \cdot (1-\cos(\Theta))}{(1+k \cdot (1-\cos(\Theta)))^2} \right)} \quad (5)$$

Для расчета тормозного излучения, образовавшегося в образце, воспользуемся формулой Крамерса [13].

$$P_{E_e \rightarrow E} = Const \cdot Z \cdot \frac{E_0 - E}{E}, \text{ при } E_e < E.$$

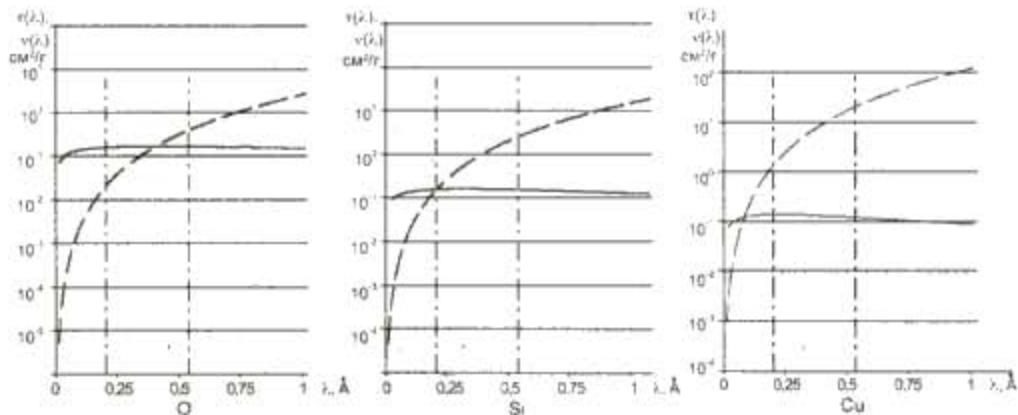
$$P_{E_e \rightarrow E} = 0, \text{ при } E_e > E. \quad (6)$$

Тогда, после замены в выражении (1) переменной  $dE_e$  на  $d\Theta$ , получаем:

$$\frac{dNc(E)}{dE} = \frac{Const}{\mu(\lambda_0) + \frac{\mu(\lambda)}{\sin(\varphi)} + \frac{\mu(\psi)}{\sin(\psi)}} \int_0^\pi \frac{d\sigma_{am}}{d\Omega} \cdot 2 \cdot \pi \cdot \sin(\Theta) \cdot P_{E_e \rightarrow E} \cdot d\Theta. \quad (7)$$

или

$$\frac{dNc(\lambda)}{d\lambda} = \frac{dNc(E)}{dE} \cdot \frac{dE}{d\lambda}. \quad (8)$$



**Рис.1.** Зависимость массового коэффициента поглощения  $t(\lambda)$ , рассчитанная согласно работе [14] (штриховая линия) и массового коэффициента комптоновского рассеяния  $\nu(\lambda)$ , рассчитанного по формуле (9) (непрерывная линия), от длины волн для кислорода, кремния, железа (штрих-пунктирной линией показаны длины волн с энергией 60 кэВ и 22 кэВ соответственно)

На рис.2. представлен энергетический спектр электронов отдачи при воздействии монохроматического излучения на образец (кислород и кремний). Спектр рассчитан согласно формуле (5).

где  $Const$  включает в себя  $Const_1$ .

Полученные выражения использованы для расчетов энергетического распределения электронов отдачи и их тормозного излучения.

### Результаты вычислений

Естественно ожидать, что роль тормозного излучения электронов отдачи в формировании рентгеновского фона будет тем больше по сравнению с ролью фото- и Оже-электронов [6], чем значительнее комптоновское рассеяние по сравнению с фотоэлектрическим поглощением.

На рис. 1 сопоставлены зависимости массовых коэффициентов фотоэлектрического поглощения  $t(l)$  и комптоновского рассеяния  $\nu(l)$  от длины волны взаимодействующего с образцом излучения для кислорода, кремния и меди.

Массовый коэффициент комптоновского рассеяния рассчитан по формуле

$$\nu(\lambda) = \sigma_{am} \cdot \frac{N_A}{A}. \quad (8)$$

где  $N_A$  - число Авогадро;  $A$  - атомный вес и

$$\sigma_{am} = \int_0^\pi \frac{d\sigma_{am}}{d\Omega} \cdot 2 \cdot \pi \cdot \sin(\Theta) \cdot d\Theta.$$

Из рис. 1 следует, что для кислорода в области до 0.4 Å (около 30 кэВ) массовый коэффициент комптоновского рассеяния выше, чем массовый коэффициент поглощения. Для Si равенство коэффициентов поглощения и комптоновского рассеяния соответствует длине волны 0.2 Å (около 60 кэВ), а для Cu - 0.1 Å (примерно 120 кэВ). В дальнейшем мы ограничимся расчетами для энергий, соответствующих источникам  $^{241}\text{Am}$  (60 кэВ) и  $^{109}\text{Cd}$  (22 кэВ), наиболее часто используемых на установках РФА с радиоизотопным возбуждением.

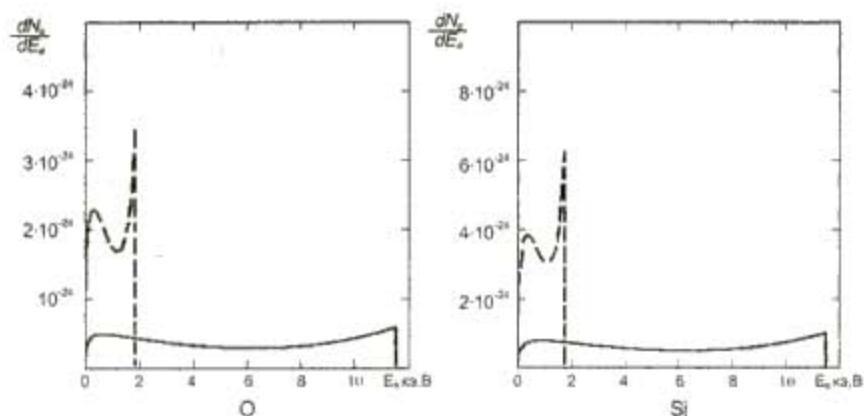


Рис.2. Энергетический спектр электронов  $\frac{dN_e}{dE_e}$  отдачи согласно формуле (5) для кислорода и кремния при энергии первичного излучения 22 кэВ (пунктир) и 60 кэВ (непрерывная)

Как видно из рис.2, площадь под кривыми как  $\frac{dN_e}{dE_e}$  для кислорода, так и для Si слабо зависит от энергии рассеиваемого излучения. Такое поведение функции объясняется практическим отсутствием наблюдаемой на рис.1 зависимости интегрального сечения некогерентного рассеяния от энергии фотонов в рассматриваемой области энергий. Обрыв функции при максимальной энергии электрона объясняется тем, что вероятность возникновения электрона отдачи с энергией  $E_e$ , определяемая формулой (5), имеет ненулевое значение при  $Q=p$ .

Следует также отметить стремление функции  $\frac{dN_e}{dE_e}$  к нулю при нулевой энергии электрона, обусловленное атомным фактором  $F_{nk}$  и не наблюдаемое в энергетическом распределении комптоновского рассеяния на свободном электроне.

На рис.3 приведен тормозной спектр электронов отдачи, рассчитанный по формуле (8) для образцов из O, Si и Cu при энергии первичных фотонов, равной 60 кэВ ( $^{241}\text{Am}$ ) и 22 кэВ ( $^{109}\text{Cd}$ ).

Из рис. 3 видно существенное различие расположения на шкале длин волн тормозных спектров электронов отдачи при комптоновском рассеянии излучений  $^{241}\text{Am}$  и  $^{109}\text{Cd}$ . Кроме того, интенсивность тормозного излучения этих электронов для  $^{109}\text{Cd}$  оказалась более чем на порядок меньше рассчитанной для  $^{241}\text{Am}$ . Скачки, наблюдавшиеся в спектральных распределениях, обусловлены тем фактом, что процесс генерации тормозного излучения происходит внутри массивного образца.

### Заключение

Полученное выражение для расчета интенсивности тормозного излучения электронов отдачи позволяет уточнить процесс формирования фона при рентгенофлуоресцентном анализе. Хотя расчеты выполнены для радиоизотопных источни-

ков монохроматического излучения, полученные результаты позволяют сделать заключение о необходимости учета рассматриваемого фактора при использовании неоднородного первичного излучения рентгеновских трубок.

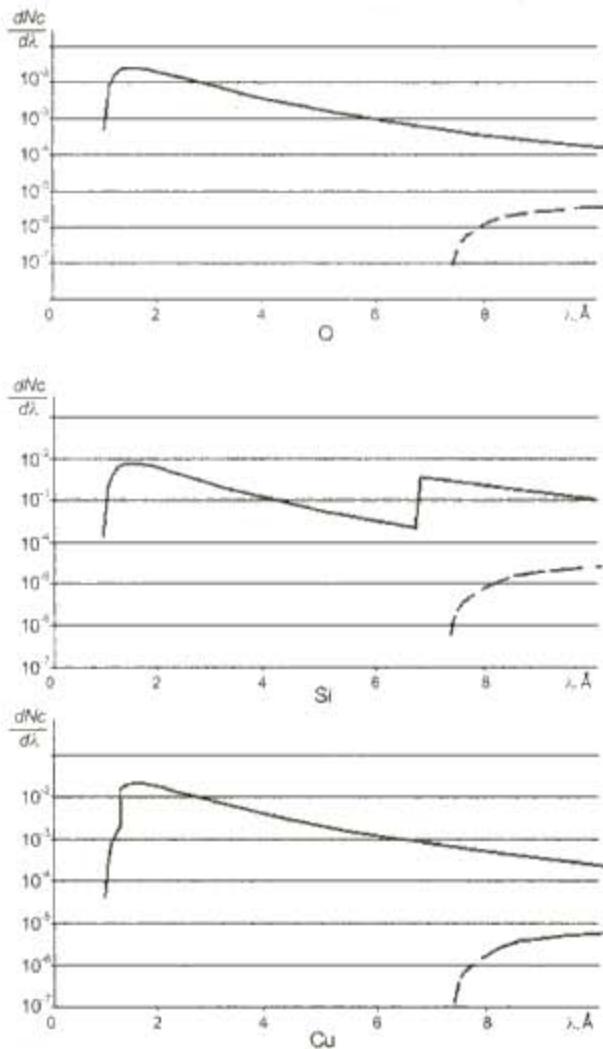


Рис.3. Тормозной спектр электронов отдачи для O, Si, Cu, рассчитанный по (8). Источники  $^{241}\text{Am}$ , 60 кэВ (непрерывная линия),  $^{109}\text{Cd}$  - 22 кэВ (пунктирная линия)

Действительно, на рентгеновские трубы по-дается, как правило, достаточно высокий потенциал порядка 40 кВ и более. При таких напряже-

ниях тормозное излучение электронов отдачи возникает уже в области К-флуоресцентного излучения элементов с атомными номерами  $Z < 25$ .

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Бахтиаров А.В. Рентгеноспектральный флуоресцентный анализ в геологии и геохимии. М.: Недра, 1985. 144 с.
2. Fernandez J.E. Rayleigh and compton scattering contributions to X-ray fluorescence intensity // X-ray spectrometry. 1992. V.21. P.57-68.
3. Fernandez J.E. Polarization effects on multiple scattering gamma transport / J.E.Fernandez, J.H.Hubbell, A.L.Hanson, L.V.Spenser // Radiation physics and chemistry. 1993. V.41, №4. P.579-630.
4. Белых В.В. Многократно рассеяное излучение при радиометрическом анализе / В.В.Белых, А.Н.Смагунова, В.А.Козлов // Журнал аналитической химии. 1994. Т.49, №10. С.1092-1096.
5. Ревенко А.Г. Исследование зависимости интенсивности рентгеновского фона в длинноволновой области от химического состава проб / А.Г.Ревенко, Г.В.Павлинский, Н.Ф.Лосев // Заводская лаборатория. 1974. Т.40, №11. С.1334-1338.
6. Павлинский Г.В. Роль ... / Иркутский гос. ун-т. Иркутск, 1983. 34. Деп. в ВИНИТИ 2.08.83, № 4268-83.
7. Ревенко А.Г. Рентгеноспектральный флуоресцентный анализ природных материалов. Новосибирск: Наука, Сиб. отд-ние, 1994. 264 с.
8. Ложкин В.И. Исследование компонента рентгенов-
- ского фона, обусловленного флуоресценцией кристалла-анализатора / В.И.Ложкин, В.П.Афонин // Заводская лаборатория. 1976. Т.42, №9. С.1073-1074.
9. Keith H.D. Calibration and use of Lithium-drifted silicon detector for accurate analysis of X-ray spectra / H.D.Keith, T.C.Loomis // X-Ray spectrometry. 1976. V.5. P.93-103.
10. Павлинский Г.В. Формирование фона кристаллодифракционной аппаратуры в длинноволновой области рентгеновского спектра / Г.В.Павлинский, Д.В.Ившев, Н.Н.Имешкенова // Журнал аналитической химии. 1991. Т.46, №3. С.525-531.
11. Блохин М.А. Физика рентгеновских лучей. М.: ГИТЛ, 1957. 518 с.
12. Бахтиаров А.В. Формулы для приближенного вычисления дифференциальных сечений рассеяния рентгеновского излучения малых энергий / А.В.Бахтиаров, Г.А.Пшеничный // Аппаратура и методы рентгеновского анализа. 1972. №11. С.200-218.
13. Kramers H.A. On the theory of X-ray absorption and continuous X-ray spectrum // Phil. Mag. 1923. V.46, №275. P.836-871.
14. Thinh T.P. New basic empirical expression for computing tables of X-ray mass attenuation coefficients / T.P.Thinh, J.Leroux // X-ray spectrometry. 1979. V.8, №2. P.85-91.

\* \* \* \*

#### COMPTON ELECTRONS BREMSSTRAHLUNG CALCULATION AT X-RAY FLUORESCENCE EXCITATION BY RADIOISOTOPE SOURCE

A.Yu.Portnoy, G.V.Pavlinsky, A.Yu.Duhanin, P.Zuzaan, B.Erdemchimeg

*It is offered the theoretical expressions related of a spectral distribution of a Compton electrons bremsstrahlung on sample element composition. The case of monochromatic primary radiation of radioactive sources  $^{241}\text{Am}$  and  $^{109}\text{Cd}$  is considered. The distribution calculations for some elements is made.*