

基于MCNP方法的不同材料X射线谱分布模拟

赵扬

成都理工大学, 核技术与自动化工程学院, 四川 成都

收稿日期: 2023年11月17日; 录用日期: 2023年12月15日; 发布日期: 2023年12月25日

摘要

在X射线荧光分析中, X射线通常由电子打靶产生。基于MCNP蒙特卡洛方法可以模拟入射电子能量、材料、靶角、铍窗厚度、探测器大小、靶的尺寸等等因素对X射线能谱的影响, 方便快捷, 成本低廉。模拟结果可以在X射线管设计前期提供数据分析和技术支持。

关键词

X射线, MCNP, 电子打靶

Simulation of X-Ray Fluorescence Spectrum Distribution in Different Materials Based on Monte Carlo Method

Yang Zhao

The College of Nuclear Technology and Automation Engineering, Chengdu University of Technology, Chengdu Sichuan

Received: Nov. 17th, 2023; accepted: Dec. 15th, 2023; published: Dec. 25th, 2023

Abstract

In X-ray fluorescence analysis, X-rays are usually generated by electron excitation. Monte Carlo Method can be used to simulate the effects of various factors, such as the incident electron energy, material, target angle, thickness of the beryllium window, detector size, and target size, on the X-ray spectrum. This method is convenient, fast and cost-effective. The simulation results can provide data analysis and technical support for X-ray tube design in the early stages.

Keywords

X-Ray, MCNP, Electron Excitation



1. 引言

自 1895 年伦琴偶然发现 X 射线以来, X 射线在医疗、工业和科学研究等领域都扮演着重要角色。在医疗领域, 常见的 X 射线成像技术、CT 断层扫描技术和 DSA 技术都利用了 X 射线在人体组织中的不同衰减系数原理进行成像[1]。工业中, X 射线荧光测量方法被用于确定矿石、泥土等样品中的元素含量, 还可以用来确定放射性样品中的放射性元素[2] [3]。科学研究方面, X 射线在研究晶体结构和材料相变中发挥重要作用, 有助于了解物质性质和结构[4]。此外, X 射线还在天体物理学研究中应用广泛, 如通过 X 射线望远镜观察宇宙中的高能天体[5]。

常用的 X 射线通常通过高速电子轰击金属靶来产生。当电子轰击靶材时, 会释放出能量, 即特征 X 射线, 可以根据需求将 X 射线用于不同的场合。近年来, X 射线的应用原来越广泛, 很多学者都开展了 X 射线能谱的研究。刘艳芳等人基于 MCNP 模拟了 X 光管, 样品和探测器距离不同时的 X 荧光计数率, 都得到了最优距离[6]。张力等人在 2021 年基于 MC 模拟了 8 种常见的阳极靶材射线管(包括: 钪(Sc)、铬(Cr)、钼(Mo)、铑(Rh)、钯(Pd)、银(Ag)、钨(W)、金(Au)), 改变入射电子的能量, 对不同靶材得到的元素特征峰计数率进行了统计整理[7]。彭博等人通过 Geant4 模拟了不同能量的入射电子与铜靶相互作用, 得到了电子在铜靶中的计数和能量分布以及角分布[8]。基于此, 为满足不同需求, 需要研究电子能量、靶材料和靶角等因素对 X 射线能谱的影响[9]。因此, 本文以常见的钼、钨和钨作为靶材, 基于 MCNP 进行了韧致辐射效率和 X 射线谱与靶材料关系的研究。同时, 还讨论了靶材料和厚度对 X 射线能谱的影响, 为 X 射线的应用提供了参考。

2. 电子与物质的相互作用过程

电子与物质的主要相互作用形式主要是散射, 散射一般又分为弹性散射和非弹性散射。当电子与物质碰撞之后, 电子只改变了方向不改变能量称为弹性散射, 当电子的方向和能量均发生改变之后称为非弹性散射。在发生非弹性散射时, 一束高能电子经过原子时, 会与原子内的电子发生相互作用, 使电子跃迁到更低的能级, 同时释放出能量以 X 射线的形式发射出来。由于每个元素都有其独特的电子能级结构, 因此产生的 X 射线会具有独立的特征谱线, 称为特征 X 射线[10]。而韧致辐射则是指在电子经过物质时加速运动产生的辐射。当高能电子穿过物质中的原子时, 与原子中电子和原子核产生库仑相互作用, 减速并改变运动方向, 这样就会发射出辐射。所以原级 X 射线通常包括连续谱和特征谱[11]。

特征 X 射线和韧致辐射都是 X 射线成像和分析的主要来源, 然而它们各自的特点和应用场景是不同的。特征 X 射线具有很高的空间分辨率和元素选择性, 因此常被用于材料分析等领域。韧致辐射具有很高的能量连续性和较高的辐射产量, 被广泛应用于放射治疗、无损检测和高能物理学等领域。

3. MCNP 仿真模型建立

3.1. MCNP 蒙特卡洛简介

MCNP (Monte Carlo Method) 是一个基于蒙特卡罗方法的通用软件包, 由美国洛斯阿拉莫斯国家实验室开发。它用于计算三维复杂几何中的中子、光子、电子或耦合中子/光子/电子输运问题[12]。传统的经验方法由于不能逼近真实的物理过程, 很难得到满意的结果, 而 MC 方法是基于模型基础上加于

概率计算的方法，是高级数学的一个分支，也可以说蒙特卡罗方法是一种特殊数学概率求法，发源于概率数学物理方法，蒙特卡罗方法在相同的实验条件下可能得出可以近相等的概率数值，以此来求一堆数据的平均值、期望以及数据的加权平均。因此，MCNP 可以用来模拟电子打靶产生 X 射线问题[13][14]。

在 MCNP 的输入文件中，可以通过曲面卡构建曲面，再通过栅元卡将曲面构建成几何图形。还可以设置材料卡添加模型所需材料，计数卡用来统计物理量。

3.2. MCNP 仿真模型

本文基于 MCNP，模拟了单能单束的电子与靶材料的相互作用，从而获得 X 射线的能谱。首先建立了一个位于坐标系原点的长方体靶，尺寸为 $0.8\text{ cm} \times 0.3\text{ cm} \times 0.8\text{ cm}$ ，半径 2 cm 的铍窗位于距离靶中心 5.09 cm 的位置，在铍窗后建立一个半径 2 cm 的曲面作为探测器的收集极。入射电子设置在距离原点 1 cm 处。具体的模型如图 1 所示：

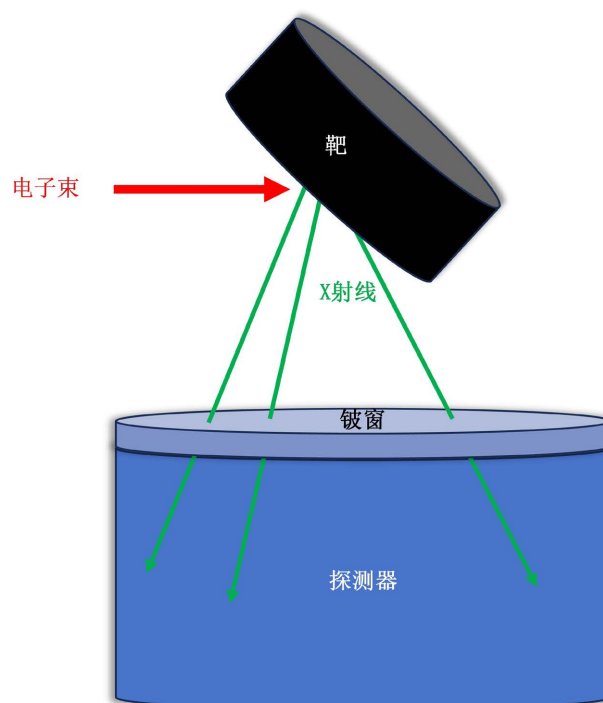


Figure 1. Schematic diagram of X-rays produced by electronic target shooting

图 1. 电子打靶产生 X 射线示意图

4. 仿真结果分析

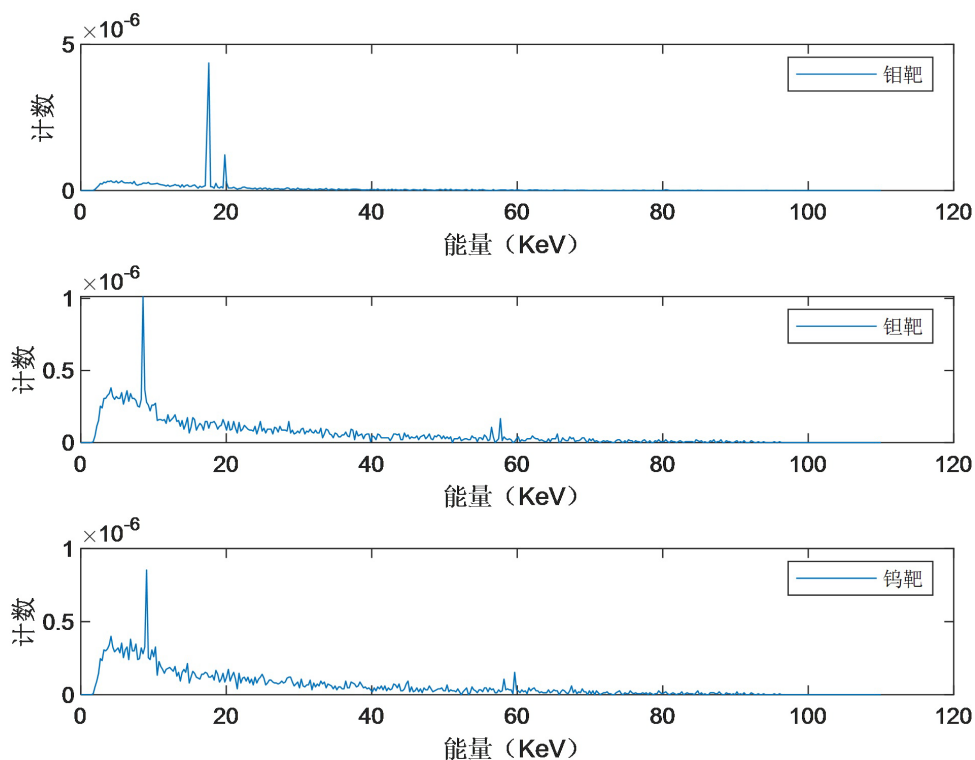
4.1. 不同靶材料的 X 射线原级谱

目前常用的靶材料有钽靶、钼靶和钨靶等，不同的靶有不同的特征 X 射线，其中一部分的特征 X 射线如表 1 所示。

一般选取的入射电子的能量要高于目标元素特征 X 射线跃迁所需的最低能量[11]。综合考虑表 1 中所示的不同靶的特征 X 射线能量，最终选取的入射电子的能量为 100 KeV 。通过 MCNP 模拟，得到的三种靶材料的 X 射线原级谱如图 2 所示：

Table 1. Characteristic X-rays of different target materials**表 1.** 不同靶材料的特征 X 射线[15]

靶材料	$K_{\alpha 1}$ (KeV)	$K_{\alpha 2}$ (KeV)	$K_{\beta 1}$ (KeV)	$K_{\beta 2}$ (KeV)
钼(Mo)	17.478	17.373	19.607	19.964
钽(Ta)	57.524	56.270	65.210	66.999
钨(W)	59.310	57.973	67.233	69.090

**Figure 2.** X-ray primary spectra of different target materials under 100 KeV incident electron energy**图 2.** 100 KeV 入射电子能量下不同靶材料的 X 射线原级谱

由图 2 可知, 当入射电子能量为 100 KeV 时, 钼靶的 X 射线原级谱中可以明显的看到两个峰, 第一个峰能量为 17.6 KeV, 第二个峰能量为 19.8 KeV。通过查询元素的特征 X 射线表可以得知, 第一个特征峰为钼的 K_{α} 特征 X 射线, 第二个特征峰为 K_{β} 特征 X 射线。钽靶的 X 射线原级谱中有三个较明显的峰, 从左到右分别为 8.56 KeV, 56.467 KeV, 57.689 KeV, 对照标准特征 X 射线能量考虑分别为 $L_{\alpha 1}$ 、 $L_{\alpha 2}$ 和 $K_{\alpha 3}$ 系特征 X 射线。钨靶的特征峰也有三个, 分别为 9.044 KeV 的 $L_{\beta 1}$, 58.178 KeV 的 $K_{\alpha 2}$ 和 59.644 KeV 的 $K_{\alpha 3}$ 特征 X 射线。因此, 在实际应用中, 可以根据实际情况考虑选择不同的阳极靶材料。

为了确定入射电子的能量对 X 射线原级谱是否有影响, 以钼靶为例, 模拟了 50 KeV、500 KeV 和 1 MeV 的单能单束的电子激发靶从而产生 X 射线原级谱。具体结果如图 3 所示。

由图 3 可知, 当入射电子的能量为 50 KeV 时, X 射线原级谱的形状与能量为 100 KeV 时的形状相同, 但对于入射电子能量为 500 KeV 和 1 MeV 时, 虽然能看到明显的峰, 但由于在模拟时划分能量区间的影响, 特征峰可能会与其他能量混叠。此外, 能量越大, X 射线原级谱的幅度会越大。因此, 在关注不同入射电子能量时, 要考虑特征峰的大小和形状, 以确保对各种情况下的分析和计算都准确无误。

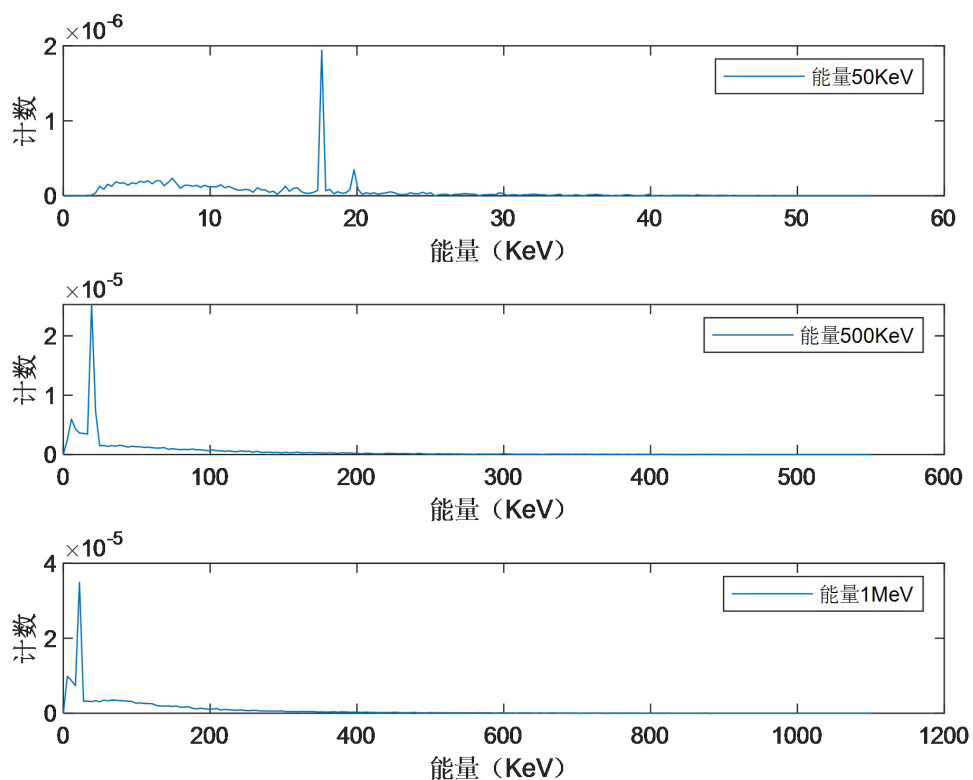


Figure 3. X-ray primary spectrum of molybdenum target under different energy incident electrons
图 3. 钼靶的不同能量入射电子下的 X 射线原级谱

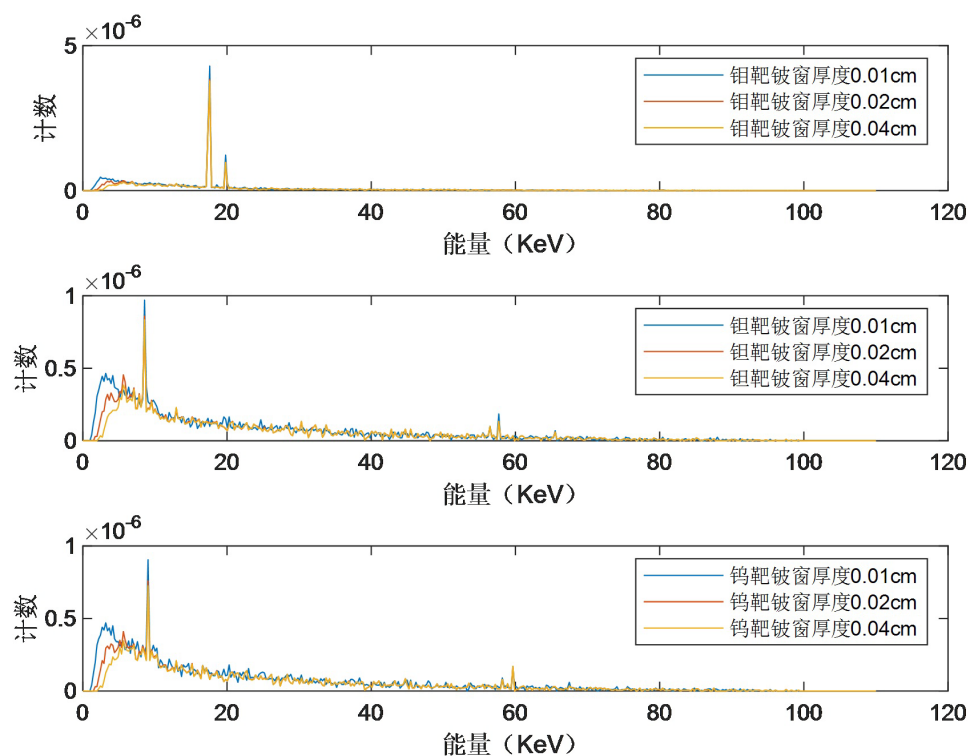


Figure 4. X-ray energy spectrum of different beryllium window thicknesses at 100 KeV energy
图 4. 100 KeV 能量下不同铍窗厚度的 X 射线能谱

4.2. 铍窗厚度对能谱的影响

由于铍窗会吸收一部分光子，所以铍窗的厚度会影响 X 射线的强度。所以选择了没有铍窗，0.2 毫米厚，0.04 毫米厚的铍窗三种情况进行模拟。具体情况如图 4 所示。

由图 4 可知，无论是钼靶、钽靶还是钨靶，随着铍窗厚度的增大，在 X 射线能谱低能量端，计数明显减小。这表明铍金属可以有效地降低 X 射线管发出的热电子流对窗口材料的热破坏，同时也可以减小低能散射射线[16]。在 5 KeV 之后，随着铍窗厚度增大，计数并没有明显减小。

4.3. 光强度随靶倾角的变化规律

由 4.1 可知，入射电子的不同对形状影响不大，这里引入一个光强的概念来评价入射电子与靶的角度对 X 射线光强度的影响[17]。

$$\text{光强度} = \text{探测器收集的光子数} / \text{入射电子数} \quad (1)$$

通过统计探测器收集极的光子数，根据公式(1)计算光强度，探究三种靶材料的光强度随入射角的变化，具体结果如图 5 所示：

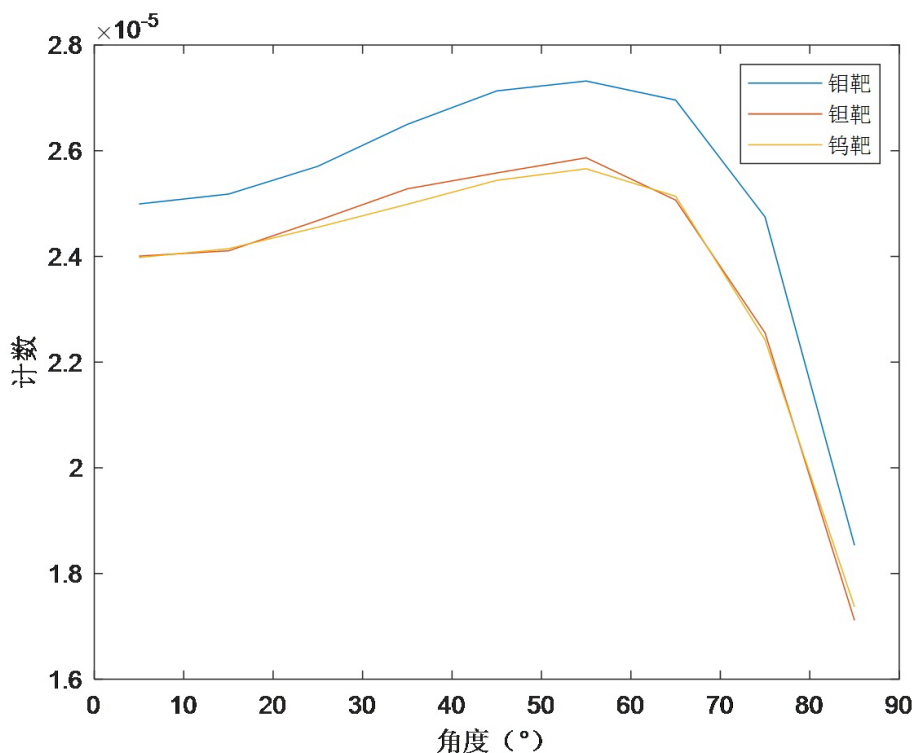


Figure 5. Changes in light intensity of different targets with target angle under 100 KeV energy
图 5. 100 KeV 能量下不同靶的光强度随靶角的变化

如图 5 所示，横坐标入射电子与靶的夹角，纵坐标表示 X 射线强度。当入射电子与靶的夹角越大，光子出束方向被靶吸收的厚度会减小，所以 X 射线强度会逐渐增大，但由于电子在靶上形成的焦斑也会随夹角变大而变大，所以存在一个最佳靶角。由图可知，当靶角为 55° 时 X 射线强度最大。

5. 总结

基于 MCNP 模拟了电子打靶产生 X 射线能谱的过程，研究了靶材、入射电子能量、靶角、铍窗厚度

对 X 射线原级谱的影响。结果表明, 钼、钽和钨三种材料的 X 射线原级谱包含了特征 X 射线能量, 与标准的特征 X 射线能量一致, 验证了模型的正确性。其次, 能量的大小会影响能谱的计数, 但在形状上有较小影响。另外铍窗会吸收一部分光子, 导致 X 射线强度减小, 还会减小能谱低端能量的强度。最后通过 X 射线强度与靶角的关系可知存在一个最佳靶角。因此, 可以通过 MCNP 模拟不同的参数对 X 射线的影响, 根据需要选取合适的靶材、铍窗厚度、靶角以及电子能量等参数, 为实验装置提供参考。

致 谢

感谢导师在方向和技术上的支持, 感谢课题组的同学在搜集资料, 整理文献等方面的帮助。

参考文献

- [1] 孔燕, 卓维海, 陈波, 等. 医用诊断 X 射线能谱的 MCNP 模拟[J]. 核技术, 2019, 42(11): 38-42.
- [2] 王莹. X 射线荧光光谱法分析地质样品的应用[J]. 冶金与材料, 2023, 43(7): 178-180.
- [3] 吴培源, 阿丽莉, 李博, 等. X 射线荧光光谱法测定伴生放射性地质样品中钍铀钍[J]. 山东化工, 2023, 52(17): 166-168+176. <https://doi.org/10.19319/j.cnki.issn.1008-021x.2023.17.066>
- [4] 黎刚, 王楠, 吴白玉. 两块晶体的硬 X 射线衍射增强成像[J]. 科学通报, 2004, 49(19): 1930-1936.
- [5] 周庆勇, 魏子卿, 雷耀虎, 等. 面向脉冲星深空基准建立的 X 射线望远镜及发展设想[J]. 航空学报, 2023, 44(3): 43-60.
- [6] 刘艳芳, 赖万昌, 谢希成, 等. 能量色散型 X 荧光分析仪光管、样品、探测器距离的蒙特卡罗优化[J]. 核电子学与探测技术, 2011, 31(9): 1038-1041+1061.
- [7] 张力, 任顺, 陆旻波, 等. MC 模拟 EDXRF 法检测土壤中不同待测元素靶材选择[J]. 核电子学与探测技术, 2021, 41(1): 77-81.
- [8] 彭博, 黄宁, 王鹏, 等. 10~50 keV 的 X 射线管韧致辐射能谱的解析计算[J]. 原子能科学技术, 2023, 57(6): 1233-1242.
- [9] 吕雅竹, 郭彬, 李德红, 等. 诊断 X 射线能谱影响因素的模拟与分析[J]. 计量学报, 2020, 41(8): 1023-1026.
- [10] 何辉, 禹海军, 王毅, 等. 4 MeV 闪光 X 光机韧致辐射靶设计[J]. 强激光与粒子束, 2019, 31(12): 90-94.
- [11] 谈春明. X 射线荧光分析原级能谱分布的 MCNP 模拟[J]. 原子能科学技术, 2010, 44(S1): 496-499.
- [12] 曾正魁, 熊厚华, 姜灿. 基于 MCNP 的电子加速器靶材料特性研究[J]. 价值工程, 2016, 35(10): 197-199. <https://doi.org/10.14018/j.cnki.cn13-1085/n.2016.10.075>
- [13] 杨体波, 王敏, 代光明, 等. 溴化镧探测器探测效率刻度及影响因素分析[J]. 核技术, 2021, 44(10): 25-31.
- [14] 严永强, 吴金杰, 金尚忠, 等. 基于 MCNP 的 X 光机模拟及足跟效应修正[J]. 计量学报, 2022, 43(6): 812-818. <https://www.renrendoc.com/paper/87561630.html>
- [15] <https://www.renrendoc.com/paper/87561630.html>
- [16] 谷懿, 熊盛青, 葛良全, 等. 微型 X 射线管出射谱特征研究及 Be 窗厚度确定[J]. 光谱学与光谱分析, 2014, 34(1): 252-256.
- [17] 李伟伟, 王立强. 反射式 X 射线管阳极钨靶的模拟优化设计[J]. 真空电子技术, 2023(4): 26-31. <https://doi.org/10.16540/j.cnki.cn11-2485/tn.2023.04.05>