

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ
УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
Иркутский государственный университет
Физический факультет

На правах рукописи

Горбунов Михаил Сергеевич

*ФИЗИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ ПРОЦЕССОВ ВОЗНИКНОВЕНИЯ ФОНА
ПРИ ВОЗБУЖДЕНИИ РЕНТГЕНОВСКОЙ ФЛУОРЕСЦЕНЦИИ*

01.04.07 - физика конденсированного состояния

Диссертация на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Научный руководитель -
доктор физ.-мат. наук, профессор
Павлинский Гелий Вениаминович

Иркутск – 2016

Оглавление

Введение 5

Глава 1. Модели формирования сигнала и фона в рентгеновской спектроскопии⁹

1.1	Методы рентгеновской спектрометрии.....	9
1.2	Процессы взаимодействия излучения с веществом.....	15
1.2.1	<i>Процесс фотопоглощения.....</i>	<i>21</i>
1.2.2	<i>Процесс когерентного рассеяния.....</i>	<i>22</i>
1.2.3	<i>Процесс некогерентного рассеяния (эффект Комптона).....</i>	<i>23</i>
1.3	Процессы взаимодействия электронов с веществом.....	25
1.3.1	<i>Интенсивность характеристического излучения, возбужденного потоком электронов. Характеристическое излучение рентгеновской трубки.....</i>	<i>25</i>
1.3.2	<i>Тормозное излучение электронов.....</i>	<i>28</i>
1.4	Источники первичного рентгеновского излучения.....	30
1.4.1	<i>Радиоизотопные источники рентгеновского излучения (²⁴¹Am, ¹⁰⁹Cd).....</i>	<i>30</i>
1.4.2	<i>Рентгеновские трубки.....</i>	<i>31</i>
1.5	Детекторы рентгеновского излучения.....	33
1.5.1	<i>Пропорциональные газовые детекторы рентгеновского излучения.....</i>	<i>35</i>
1.5.2	<i>Сцинтилляционный детектор рентгеновского излучения.....</i>	<i>35</i>
1.5.3	<i>Полупроводниковые детекторы рентгеновского излучения.....</i>	<i>36</i>
1.6	Использование метода Монте-Карло для моделирования процессов взаимодействия и расчетов рентгеновских спектров.....	44

Цели и задачи работы..... 46

Глава 2. Роль тормозного излучения фото, Оже и комптоновских электронов в формировании фона в аппаратуре с волновой дисперсией..... 47

2.1	Моделирование вклада тормозного излучения фото -, Оже и Комптоновских электронов.....	47
2.1.1	<i>Тормозное излучение свободных электронов.....</i>	<i>47</i>
2.1.2	<i>Оценка вкладов компонентов тормозного излучения свободных электронов в фоновый сигнал и его соотношение с рассеянным первичным излучением.....</i>	<i>51</i>
2.2	Экспериментальная оценка вклада тормозного излучения свободных электронов.....	55
2.2.1	<i>Вклад отражения кристалл-анализатором рассеянного излучения высших порядков.....</i>	<i>56</i>
2.2.2	<i>Вклад флуоресценции кристалла-анализатора.....</i>	<i>57</i>
2.2.3	<i>Вклад диффузного рассеяния на кристалле-анализаторе.....</i>	<i>58</i>
2.2.4	<i>Вклад свободных электронов.....</i>	<i>60</i>
2.3	Сравнение экспериментальных и расчетных данных.....	61
2.4	Выводы по главе.....	64

Глава 3. Моделирование функции отклика полупроводниковых детекторов. 65

3.1	Совершенствование модели расчета функции отклика полупроводникового детектора с учетом мертвого слоя.....	66
3.1.1	<i>Адаптация модели</i>	66
3.1.2	<i>Результаты расчета функции отклика детектора</i>	77
3.1.3	<i>Сопоставление с экспериментальными данными</i>	86
3.2	Модель двухслойного детектора.....	87
3.2.1	<i>Описание модели</i>	88
3.2.2	<i>Результаты моделирования процессов в двухслойном детекторе</i>	93
3.3	Выводы по главе.....	98

Глава 4. Оценка влияния геометрических особенностей энергодисперсионного спектрометра на формирование сигнала и фона при учете многократного рассеяния. 99

4.1	Описание модели.....	99
4.2	Сопоставление результатов расчета и эксперимента.....	104
4.3	Вывод по главе.....	105

Заключение 106

Список публикаций по теме диссертации..... 108

Список литературы..... 111

Список обозначений и их определения

E - энергия, [кэВ].

$$\lambda = \frac{12.345}{E} - \text{длина волны, [\AA]}$$

Z -атомный номер;

A - атомный вес;

N_A – число Авогадро $6.02 \cdot 10^{23}$ моль⁻¹

e - заряд электрона;

m_e - масса покоя электрона

\hbar - постоянная Планка;

Γ - ширина энергетического уровня,

$$r_0 = \frac{e^2}{m_e c^2} - \text{классический радиус электрона}$$

$$a = \frac{\hbar}{m_e e^2} - \text{Боровский радиус электрона}$$

Введение

Рентгеновская флуоресценция является важной характеристикой элементного состава вещества, это послужило основой для создания рентгенофлуоресцентного метода анализа. Основными преимуществами этого метода являются простота выполняемых операций, высокая экспрессность и точность. Это привело к широкому применению рентгенофлуоресцентного анализа в науке и на производстве. Возбуждение атомов рентгеновскими фотонами должно исключать возникновение фона, по сравнению с возбуждением корпускулярными частицами (электронами), сопровождающимся тормозным излучением, но рентгеновский фон остается достаточно высоким и ограничивает чувствительность метода, ухудшая порог обнаружения элементов. Изучению влияния различных факторов на формирование фона при рентген-флуоресцентном методе анализа посвящен ряд работ [1,2,3,4]. Однако, неточности используемых моделей возникновения фоновой составляющей не позволяют в полной мере описать формирование спектрометрического сигнала с необходимой точностью.

Среди основных составляющих фона можно выделить следующие: первая является следствием взаимодействия первичного излучения с атомами вещества образца; вторая определяется особенностями системы детектирования (спектрометры с энергетической или волновой дисперсией) и геометрических особенностей спектрометрического тракта; третья возникает, как функция отклика детектора на регистрируемый сигнал.

Для первой составляющей основным вкладом в формирование фонового сигнала является когерентное и некогерентное рассеяние неоднородного первичного излучения от образца. В области малых энергий ($\leq 1-2$ кэВ) интенсивность первичного излучения рентгеновской трубки в значительной мере поглощается выходным окном, поэтому вклад тормозного излучения фото-, Оже и комптоновских электронов, возникающих в облучаемом материале становится преобладающим. Пренебрежение вкладом процессов многократного взаимодействия первичного излучения в веществе образца также увеличивает неопределенность описания соотношения фон/сигнал [5, 6, 7].

Вторая составляющая различна для аппаратуры с волновой и энергетической дисперсией. При волновой дисперсии необходим учет вклада собственной флуоресценции и диффузного рассеяния кристалла – анализатора спектрометрического канала. Для

энергодисперсионных спектрометров с широким диапазоном углов взаимодействия (углов падения первичного излучения и отбора флуоресцентного излучения необходимо учитывать) необходимо учитывать, что энергия комптоновского рассеянного излучения существенно зависит от угла рассеяния и приводит к дополнительному уширению пика некогерентного рассеяния. Предложенные физико-математические модели описания процессов взаимодействия в таких спектрометрах, например [8], не учитывают вклад многократных процессов. Вклад многократных процессов также может существенно влиять на формирование фоновой составляющей [5,7].

Третья составляющая особенно значима для энергодисперсионной аппаратуры, в которой для регистрации излучения используются полупроводниковые детекторы. Функция отклика такого детектора определяет формирование фонового сигнала. Необходимо отметить, что процессам неполного сбора заряда, связанного с наличием «мертвого» слоя детектора, выходом вторичных электронов из чувствительной области детектора и оценке их вклада в формирование функции отклика детектора уделяется недостаточно внимания. Большой интерес представляет выбор оптимальных параметров детектора для решения широкого круга аналитических задач на основе информации о составе фонового излучения и правильного его учета.

Научная новизна:

1. Показано, что тормозное излучение фото-, Оже- и комптоновских электронов (свободных электронов) вносит существенный вклад в интенсивность фонового сигнала в области аналитических линий элементов с малым атомным номером ($Z \leq 11$). Учет этого вклада позволяет уточнить модель формирования сигнала и фона;
2. Предложена физико-математическая модель двухслойного полупроводникового детектора (Si-Ge), состоящего из ближайшего к источнику излучения кремниевого и дальнего германиевого детектора. Показано, что применение двухслойного детектора уменьшает вероятность регистрации высокоэнергетического излучения в «горбе» потерь и пиках потерь по сравнению с одиночными Ge и Si(Li) детекторами;
3. Предложена методика расчета амплитудного спектра, зарегистрированного энергодисперсионным спектрометром, учитывающая как многократные взаимодействия излучения в образце и детекторе, так и геометрические особенности системы источник-образец-детектор.

Практическая значимость. Физико-математическая модель полупроводникового детектора применительно к энергодисперсионной аппаратуре позволяет определить влияние детектирующей системы на формирование амплитудного спектра флуоресцентного.

В перспективе использование комбинированного полупроводникового детектора позволит улучшить контрастность и снизить порог обнаружения элементов за счет уменьшения значимых искажений функции его отклика, возникающих в процессе взаимодействия рассеянного первичного и флуоресцентного излучения образца с веществом детектора.

Разработана методика расчета амплитудного спектра излучения, учитывающая вклад геометрических особенностей спектрометрического тракта, процессов многократного взаимодействия первичного и флуоресцентного излучения, влияние функции отклика детектора. Эта методика позволяет моделировать геометрические и конструктивные особенности спектрометрического тракта энергодисперсионного спектрометра.

Защищаемые положения:

1. Теоретические расчеты и экспериментальные исследования вклада тормозного рентгеновского излучения фото-, Оже и комптоновских электронов показывают существенное влияние этого вклада на интенсивность рентгеновского фона в области аналитических линий элементов с малым атомным номером ($Z \leq 11$). Определены граничные условия, при которых вклад тормозного рентгеновского излучения фото-, Оже и комптоновских электронов, по сравнению с рассеянным первичным излучением, становится преобладающим;

2. Двухслойный комбинированный полупроводниковый детектор, состоящий из ближайшего к источнику излучения кремниевого и дальнего германиевого детектора, улучшает соотношения сигнал/фон при регистрации фотонов высоких энергий, а в области малых энергий за счет снижения вкладов, связанных с искажениями функции отклика;

3. Предложенная модель учета влияния «мертвого слоя» на функцию отклика полупроводникового детектора позволяет оценить граничные условия, при которых вклад «мертвого слоя» соизмерим с вкладом выхода электронов высоких энергий из детектора. Показано, что вкладом «мертвого» слоя можно пренебречь при его толщине менее $0.1 \mu\text{m}$;

4. Методика расчета амплитудного спектра излучения, зарегистрированного энергодисперсионным спектрометром с возбуждением кольцевым радиоизотопным

источником ^{241}Am , учитывающая вклад многократных процессов взаимодействия первичного рассеянного и флуоресцентного излучения образца, геометрические особенности и функцию отклика детектирующей системы, позволяет существенно уменьшить неопределенность фона в области пика некогерентного рассеяния первичного излучения источника.

Личный вклад автора. Основные результаты работы получены при личном участии автора. Печатные работы, отражающие основные защищаемые положения основаны на данных полученных автором лично.

Достоверность полученных результатов обеспечивается хорошим согласием расчетных моделей и проведенными экспериментальными исследованиями, а также сравнением с литературными данными.

Апробация работы. Материалы работы представлялись на V- VIII Всероссийской конференции по рентгеноспектральному анализу (2006, 2014 в Иркутске, 2008 в Краснодаре и 2011 г Новосибирске); XVIII Уральской конференции по спектроскопии (г. Новоуральск, 2007 г.); на Conference on X-Ray Analysis (2006, Улан-Батор, Монголия).

Публикации. По материалам диссертации опубликовано 11 статей в журналах из перечня, утвержденного ВАК, 8 тезисов докладов в сборниках трудов научных конференций и 1 патент.

Структура и объем диссертации. Работа состоит из введения, четырех глав и заключения; списка литературы (156 ссылок) и изложена на 125 страницах, включая 51 рисунок и 9 таблиц.

Глава 1. Модели формирования сигнала и фона в рентгеновской спектроскопии

1.1 Методы рентгеновской спектрометрии

Рентгеновские спектрометры грубо можно разделить на две основные группы: с волновой (WDXRF) и энергетической дисперсией (EDXRF) [9]. Современные спектрометры состоят из следующих базовых элементов: источник излучения, спектрометрический тракт, счетная и регистрирующая электроника.

Упрощенная структурная схема спектрометра с волновой дисперсией представлена на рис. 1.1. [10]

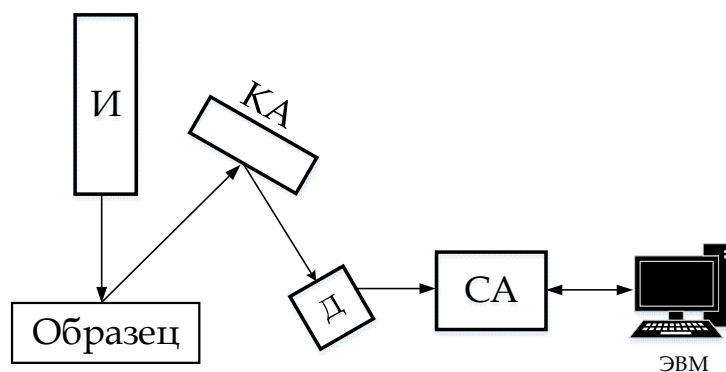


Рис. 1.1. Упрощенная структурная схема спектрометра с волновой дисперсией. И- источник излучения (рентгеновская трубка), КА- кристалл-анализатор, Д- детектор рентгеновского излучения, СА- амплитудный анализатор и счетная аппаратура.

Для разложения излучения в спектр на составляющие в аппаратуре этого типа используется принцип волновой дисперсии кристалл-анализатора. Закон Вульфа-Бреггов для дифракции рентгеновских лучей на монокристалле имеет следующий вид [11]:

$$\sin \theta = n\lambda / 2d,$$

θ -угол дифракции рентгеновских лучей с длиной волны λ , n -порядок отражения в кристалле, d - межплоскостное расстояние в кристалле. Из этого выражения следует, что при изменении угла θ за счет положения кристалла, можно последовательно выделять рентгеновские лучи с заданной длиной волны λ . Устройство современных спектрометров с волновой дисперсией позволяет поворачивать кристалл на углы от 20° до 70° [12].

Параметры наиболее часто применяемых кристаллов в данном типе аппаратуры рассмотрены, например, в [4].

Кристалл-дифракционные каналы собирают по определенной оптической схеме, определяющей взаимное расположение деталей спектрометрического канала: источника рентгеновского излучения (обычно рентгеновской трубки), образца, кристалл – анализатора и детектора.

Согласно схеме Соллера (см. рис. 1.2.) между образцом и кристаллом помещается коллиматор, представляющий собой набор параллельных пластин. При помощи коллиматора K_1 отбирается параллельный пучок со сходимостью лучей δ , определяющий разрешающую способность спектрометра и влияющий на светосилу пучка. Коллиматор K_2 предназначен для снижения уровня фонового излучения, обусловленного рассеянием первичного излучения на образце. Кинематической схемой необходимо обеспечить поворот кристалла-анализатора на угол θ и синхронное с ним перемещение детектора на угол 2θ . Схема Соллера используется в сканирующих автоматических спектрометрах.

Широко распространены рентгенооптические схемы для фокусировки, в которых применяется схема с изогнутым кристаллом - Иоганссона и Иоганна. (см рисунок 1.2.).

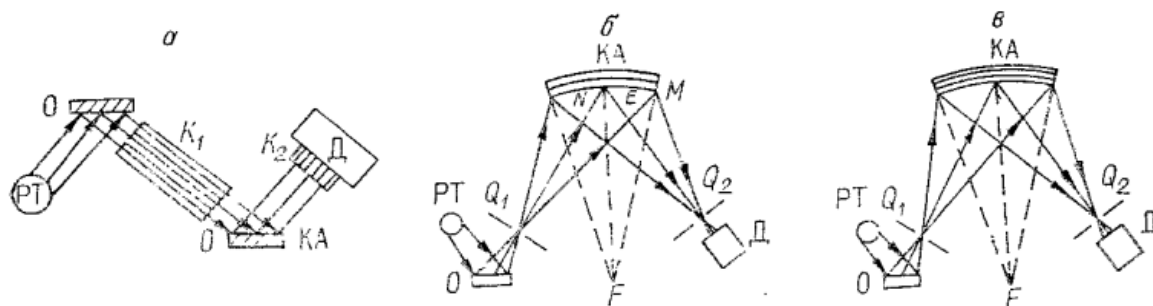


Рис. 1.2. Рентгенооптические схемы волнодисперсионных спектрометров. а) Схема Соллера; б) Схема Иоганна в) Схема Иоганссона.

КА- кристалл анализатор, **K1, K2** - коллиматоры , **Д-** детектор, **РТ** - рентгеновская трубка, **О-** образец, **Q1, Q2** – щели, **F** – фокусное расстояние изогнутого кристалла.

В работе [4] приведен обзор компонентов амплитудного спектра волнодисперсионной аппаратуры, влияния интенсивности на ширину линий спектра. В этой работе рассмотрена модель компонентов спектра, в том числе для интенсивности

фонового излучения для кристалл-дифракционной аппаратуры, состоящая из следующих компонентов:

$$I_{\phi} = I_{p\lambda_1} + I_{p\lambda_2} + I_g^n + I_g^{\phi l} + I_n^{\phi l} + I_{\phi l}^{\phi l} + I_s + I_c, \quad (1.1)$$

где $I_{p\lambda_1}$ и $I_{p\lambda_2}$ - фон, связанный с брэгговским отражением кристалл-анализатором рассеянного образцом первичного излучения рентгеновского источника в первом и во втором порядках отражения (см. ,например, работу [13]; I_g^n и $I_g^{\phi l}$ - диффузное рассеяние на кристалл-анализаторе первичного и флуоресцентного излучений(см. [14]); $I_n^{\phi l}$ и $I_{\phi l}^{\phi l}$ - флуоресцентное излучение атомов кристалла, возбуждаемых рассеянным на образце первичным и флуоресцентным излучением образца; I_s - тормозное излучение вторичных электронов образца, рассмотрен в работах [15,16,17]; I_c - вклад излучения, рассеянного на деталях спектрометра.

В зависимости от выбранной рентгенооптической схемы и конфигурации спектрометра вклады каждого из компонентов фона могут значительно варьировать.

Преимущество рентгенооптических схем с фокусирующим кристаллом заключается не только в лучшей разрешающей способности, но и в значительном снижении диффузной и рассеянной составляющей фонового излучения [18]. В работе [19] показано, что вклад диффузного излучения при определенных условиях может достигать до 80%.

Основной составляющей фонового излучения аналитического рентгенофлуоресцентного сигнала является тормозное излучение, генерируемое рентгеновской трубкой и рассеянное на анализируемом объекте[4]. Для длинноволновой области составляющая первичного излучения поглощается окном трубки, следовательно, при определении содержаний элементов с малыми атомными номерами на формирование рентгеновского фона может оказать существенное влияние тормозное излучение фото-, Оже и Комптоновских электронов, возникающих в облучаемом материале. Ионизация электронных оболочек атомов фото- и Оже электронами изучена в настоящее время достаточно хорошо [20,21], но тормозное излучение этих электронов исследовано не в полной мере[15], нет экспериментальной оценки и сравнения вклада этой составляющей в формирование рентгеновского фона.

Упрощенная структурная схема спектрометра с энергетической дисперсией приведена на Рис. 1.3. [10,22]

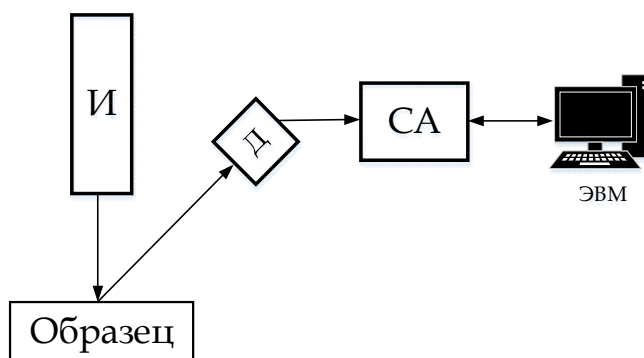


Рис. 1.3. Упрощенная структурная схема спектрометра с энергетической дисперсией. И- источник излучения (рентгеновская трубка), Д- детектор рентгеновского излучения, СА- анализирующая и счетная аппаратура.

Появление полупроводниковых детекторов высокого разрешения способствовало образованию нового класса оборудования для рентгеновского спектрального анализа – энерго-дисперсионной аппаратуры (EDXRF), которая основана на амплитудном анализе поступающих с детектора сигналов [12,23]. Данная аппаратура имеет ряд существенных преимуществ: одновременная регистрация всего спектра; сравнительно малые габариты и низкую стоимость приборов.

В качестве источников возбуждения в данном типе спектрометров используются радиоизотопные источники рентгеновского излучения, а также обычно маломощные рентгеновские трубки, в частности, прострельного типа. По реально достигаемым пределам обнаружения элементов, а также разрешающей способности, EDXRF значительно уступает WDXRF, особенно в области малых энергий[10].

Структура аналитического сигнала и фона для аппаратуры с энергетической дисперсией значительно отличается от таковой для аппаратуры с волновой дисперсией. Это связано с отсутствием некоторых элементов спектрометрического тракта, а также особенностями его геометрии. Структура сигнала в различных областях спектра при этом не постоянна и зависит от спектра первичного излучения. Состав фона в основном определяется функцией отклика детектора, ее зарядовой и комптоновской частью, многократно рассеянным излучением источника и условиями возбуждения [24].

Типичные схемы спектрометров [23] с возбуждением флуоресценции с помощью рентгеновской трубки представлены на Рис. 1.4, для радиоактивных источников на Рис. 1.5

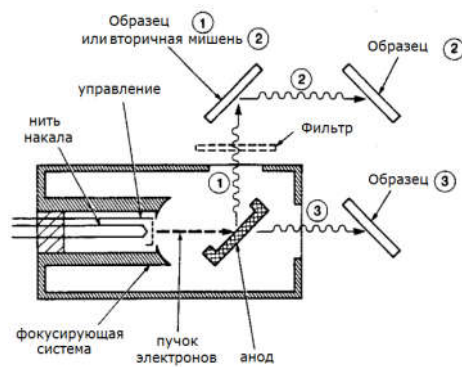


Рис. 1.4. Типичная схема EDXRF спектрометра с возбуждением излучением рентгеновской трубки: 1) непосредственно излучением трубки 2) возбуждение от вторичной мишени 3) возбуждение излучением рентгеновской трубки прострельного типа.

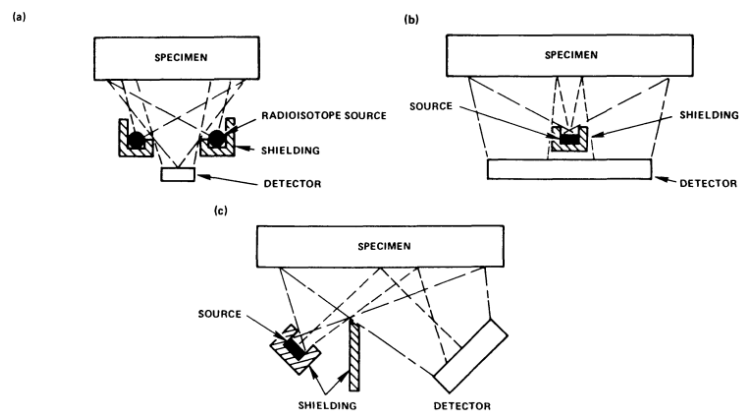


Рис. 1.5. Схема спектрометров EDXRF с возбуждением радиоизотопными источниками излучения: а) кольцевой источник б) с центральным расположением источника с) боковым расположением источника.

На Рис. 1.6 представлены системы существующих энергодисперсионных спектрометров рентгеновского и гамма излучения [25].

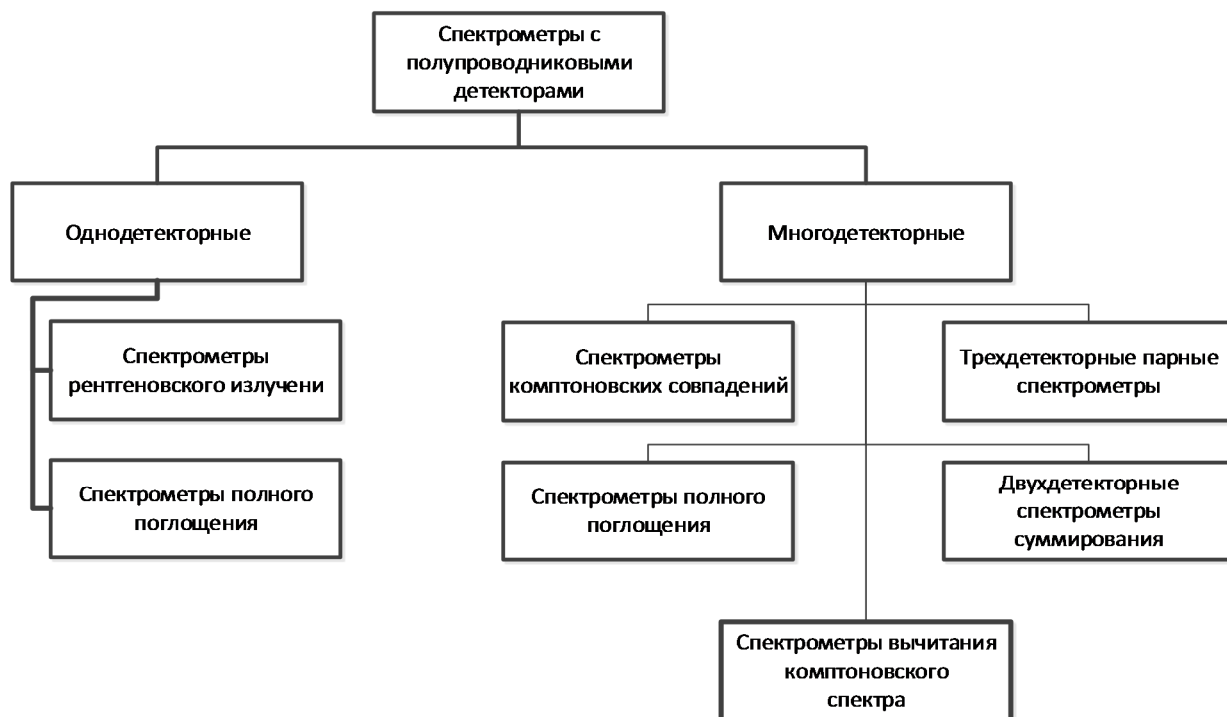


Рис. 1.6. Энергодисперсионные спектрометры гамма и рентгеновского излучения[25]

Обычно EXDRF спектрометры имеют один детектор, однако, существуют и более сложные системы детектирования с несколькими детекторами.

Многодетекторные спектрометры можно разделить на следующие группы:

Комптоновские спектрометры совпадений. Принцип действия спектрометра совпадений основан на регистрации рассеянного гамма фотона от электронов отдачи в пределах чувствительной зоны анализирующего детектора при условии, что рассеянный фотон будет детектирован управляющим детектором.

Спектрометры с защитным сцинтиллятором на антисовпадениях. Принцип работы этих спектрометров основан на том, что ППД окружается сцинтиллятором достаточного объема, который называется защитным. Сигнал со сцинтиллятора подается на схему усиления, а затем совместно с сигналом основного детектора на схему антисовпадений. Комптоновское взаимодействие создающее импульс в ППД, сопровождается регистрацией рассеянного фотона в сцинтиляторе. Схема антисовпадений не блокирует только те сигналы, которые идут с ППД и при этом не совпадают по времени с сигналом в защитном сцинтиляторе. Это позволяет регистрировать излучение только в пике полного поглощения ППД, с минимальным вкладом остаточного непрерывного излучения в низкоэнергетической зоне детектора.

Спектрометры суммирования используют свойства определенной геометрической схемы спектрометра с суммированием импульсов от 2-х или более детектирующих узлов.

Комбинирование различных свойств детекторов широко используется в спектрометрии. В работе [26] представлен спектрометр гамма излучения на базе сегментированного детектора из особо чистого германия с эффективностью 60%. Использование данного типа детектора позволяет улучшить соотношение пик/фон при энергии 662 кэВ в 1.4 раза. Детектор представляет собой коаксиальный кристалл n-типа, внешний контакт которого сегментирован гравировкой и травлением с кольцевой канавкой, в результате которых формируется планарный слой в торце. Фотоны с низкой энергией с большой долей вероятности поглощаются в планарной области, с высокой энергией в коаксиальной. Фотоны, зарегистрированные в обеих областях, могут быть запрещены электроникой. Данный детектор позволяет эффективно подавлять вклад функции отклика детектора, связанный с комптоновским рассеянием (т.е. режекция вклада «горба потерь», либо как наиболее часто представлено в иностранной литературе «плато» потерь).

1.2 Процессы взаимодействия излучения с веществом.

Традиционно для расчетов спектров рентгеновской флуоресценции используют макроскопическую модель, представленную на Рис. 1.7. [27]. Использование этой модели в условиях массивного образца и незначительной девиации углов рассеяния свойственной для аппаратуры с волновой дисперсией может давать результат приемлемой точности.

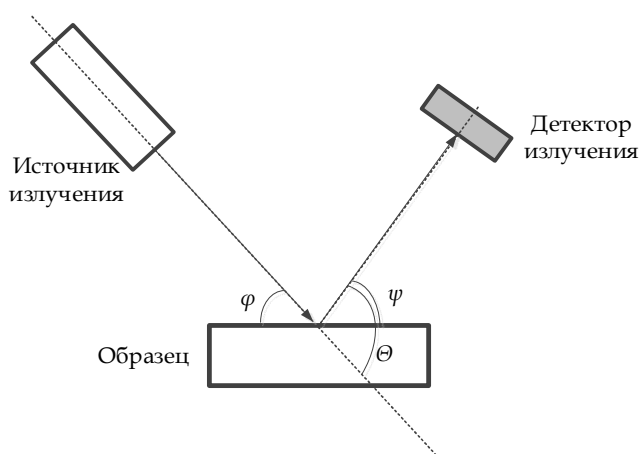


Рис. 1.7. Традиционная модель для расчета рентгеновской флуоресценции.

Более детально процессы преобразования энергии при взаимодействии излучения с веществом, использующие методы итерационного решения транспортного уравнения Больцмана рассмотрены в работах [5,28]. Согласно этим работам излучение

монохроматического коллимированного пучка первичного рентгеновского излучения I_0 (фотон/секунда), падающего под углом ϑ_0 к поверхности полубесконечного однородного образца, преобразуется в поток излучения $f(z, \omega, \lambda)d\lambda d\omega$, возникающий внутри этого образца и покидающего точку возникновения под углом ϑ . Функция $f(z, \omega, \lambda)d\lambda d\omega$ определяется числом фотонов в диапазоне длин волн от λ до $\lambda + d\lambda$ и направлением от ω до $\omega + d\omega$ через единицу площади поверхности образца (см. Рис. 1.8).

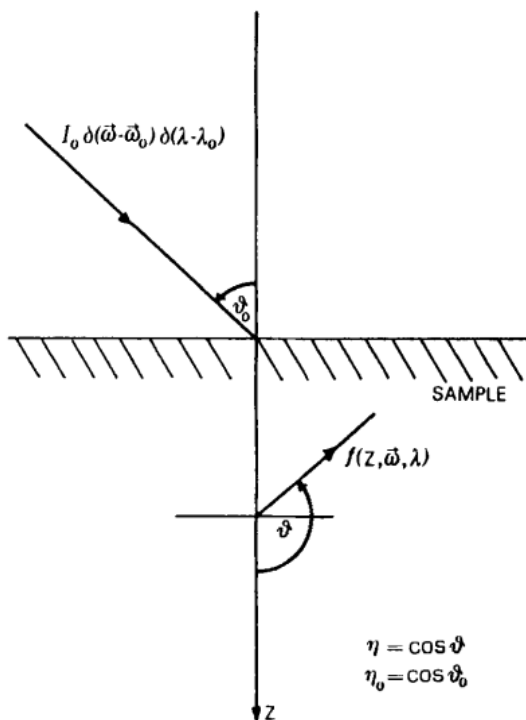


Рис. 1.8. Графические пояснения к описанию процессов переноса энергии в случае облучения бесконечного однородного полу бесконечного образца.

Балансовое уравнение соответственно представлено в виде интегрально-дифференциального уравнения переноса:

$$\eta \frac{\partial f(z, \omega, \lambda)}{\partial z} = -\mu(\lambda) f(z, \omega, \lambda) + \int_0^{\infty} d\lambda' \times \int_{4\pi} d\omega' k(\omega, \lambda, \omega', \lambda') \aleph(z) f(z, \omega', \lambda') + I_0 \delta(\omega - \omega_0) \delta(\lambda - \lambda_0), \quad (1.2)$$

где $\aleph(z)$ -единичная функция Хэвисайда, ядро $k(\omega, \lambda, \omega', \lambda')$ - определяет плотность вероятности преобразования фотона с длиной волны λ и направлением ω в λ' и ω' .

В первом приближении данное уравнение, согласно работе [6], может иметь следующее решение для первого порядка функции потока при известном ядре $k(\omega, \lambda, \omega', \lambda')$, с учетом того, что $\eta = \omega_s$

$$f^0(z, \omega, \lambda) = \frac{I_0}{2|\eta|} \delta(\omega - \omega_0) \delta(\lambda - \lambda_0) \times \exp\left[-\frac{\mu|z|}{\eta}\right] (1 + \operatorname{sgn} \eta \operatorname{sgn} z) + I_0, \quad (1.3)$$

Для n порядка функции:

$$f^n(z, \omega, \lambda) = \frac{1}{|\eta|} \left[\frac{1 + \operatorname{sgn} \eta}{2} \times \exp\left[-\frac{z\mu}{\eta}\right] \int_0^z d\tau \exp\left(\frac{\tau\mu}{|\eta|}\right) \int_0^\infty d\lambda' \int_{4\pi} d\omega' k(\omega, \lambda, \omega', \lambda') f^{(n-1)}(\tau, \omega', \lambda') + \right. \\ \left. \frac{(1 - \operatorname{sgn} \eta)}{2} \int_0^z d\tau \exp\left(-\frac{\tau\mu}{|\eta|}\right) \int_0^\infty d\lambda' \int_{4\pi} d\omega' k(\omega, \lambda, \omega', \lambda') f^{(n-1)}(\tau + z, \omega', \lambda') \right] \quad (1.4)$$

В работах [5, 6, 29] детально рассмотрены частные решения для каждого из возможных процессов, вплоть до сложных процессов вторых порядков, вклад которых может достигать нескольких процентов.

Дифференциальное поперечного сечения процессов взаимодействия в общем виде может быть представлено как:

$$\sigma(\lambda', \omega') = \int_0^\infty d\lambda' \int_{4\pi} d\omega' k(\omega, \lambda, \omega', \lambda'), \quad (1.5)$$

которое может быть сопоставлено с экспериментальными и теоретическими данными по поперечным сечениям конкретных процессов взаимодействия [6]. Сечения взаимодействия для конкретных процессов рассмотрены ниже.

Выражение для частичной интенсивности n порядка, определяемое как число фотонов за единицу времени через элемент поверхности имеет следующий вид:

$$I^{(n)}(\omega, \lambda) = |\eta| f(0, \omega, \lambda) \quad (1.6)$$

Из этого уравнения может быть получено соотношение для интенсивности второго порядка, возникающей посредством двух последовательных взаимодействий:

$$I^{(2)}(\omega, \lambda) = \frac{I_0}{|\eta|} \frac{(1 - \operatorname{sgn} \eta)}{2} \frac{1 + \operatorname{sgn} \eta}{2} \frac{1}{\frac{\mu}{\eta} + \frac{\mu_0}{\eta_0}} \times$$

$$\int_0^\infty d\lambda' \int_{4\pi} d\omega' k_a(\omega, \lambda, \omega', \lambda') k_b(\omega, \lambda, \omega', \lambda') \frac{1}{|\eta|} \times$$

$$\left[\frac{1 + \operatorname{sgn} \eta'}{2} \frac{1}{\frac{\mu}{|\eta|} + \frac{\mu_0}{|\eta_0|}} + \frac{(1 - \operatorname{sgn} \eta')}{2} \frac{1}{\frac{\mu_0}{|\eta_0|} + \frac{\mu'}{|\eta'|}} \right] \quad (1.7)$$

Решение транспортных уравнений позволяет получить детальное и точное физическое описание конкретного физического процесса, но имеет ряд существенных недостатков, связанных с крайне сложным учетом реальной геометрии процессов взаимодействия и высоких его порядков [30]. Ограничением этого метода является применимость только для массивного образца.

В условиях с широким диапазоном углов взаимодействия, свойственных современной компактной аппаратуре с энергетической дисперсией, соотношение дифференциальных сечений, используемое для расчёта интенсивности комптоновского рассеянного излучения, не применимо, так как энергия комптоновского рассеянного излучения существенно зависит от угла рассеяния θ .

Достаточно полная и системная оценка влияния углов взаимодействия рассмотрена в работе [8], для их учета введено понятие геометрического фактора $\frac{dG(\Theta)}{d\Theta}$, который учитывает при расчетах интенсивностей разброс углов θ .

В работе [8] рассмотрен расчет геометрического фактора для спектрометрического тракта энергодисперсионного спектрометра с радиоизотопным источником возбуждения (рис 1.9.). В рассматриваемой модели первичный рентгеновский фотон с энергией E_0 , испускаемый поверхностью источника площадью S_{source} в точке \vec{r}_0 , проникает в через поверхность S_{sample} образца под углом φ в глубину его рабочего объема и взаимодействует с его веществом в точке \vec{r}_1 . После взаимодействия флуоресцентный или рассеянный фотон с энергией E , покидает образец под углом ψ к его поверхности в направлении детектора. В дальнейшем он регистрируется в точке \vec{r}_3 на поверхности площадью S_{det} детектора. При этом следует отметить, что данная модель допускает, что точка входа первичного фотона \vec{r}_2 в образец и точка выхода фотона с поверхности образца

\vec{r}_3 совпадают. Энергетический спектр, с учетом этого можно записать в следующем виде[31]:

$$\frac{dN_{\text{detector}}}{dE} = \frac{\text{const}}{\left(\frac{\mu(E_0)}{\sin(\varphi_{\text{эфф}})} + \frac{\mu(E)}{\sin(\psi_{\text{эфф}})}\right)} \cdot \int_{\Theta} K(E_0 \rightarrow E, \Theta) \frac{dG(\Theta)}{d\Theta} \cdot d\Theta, \quad (1.8)$$

где $K(E_0 \rightarrow E, \Theta)$ - вероятность преобразования первичного фотона с энергией E_0 в веществе детектора в E с углом рассеяния Θ между векторами $|\vec{r}_0 - \vec{r}_{1,2}|$ и $|\vec{r}_{1,2} - \vec{r}_3|$; $\frac{dG(\Theta)}{d\Theta}$ - геометрический фактор, который определяет вероятность наблюдения события при угле однократного рассеяния Θ в заданной геометрии[8].

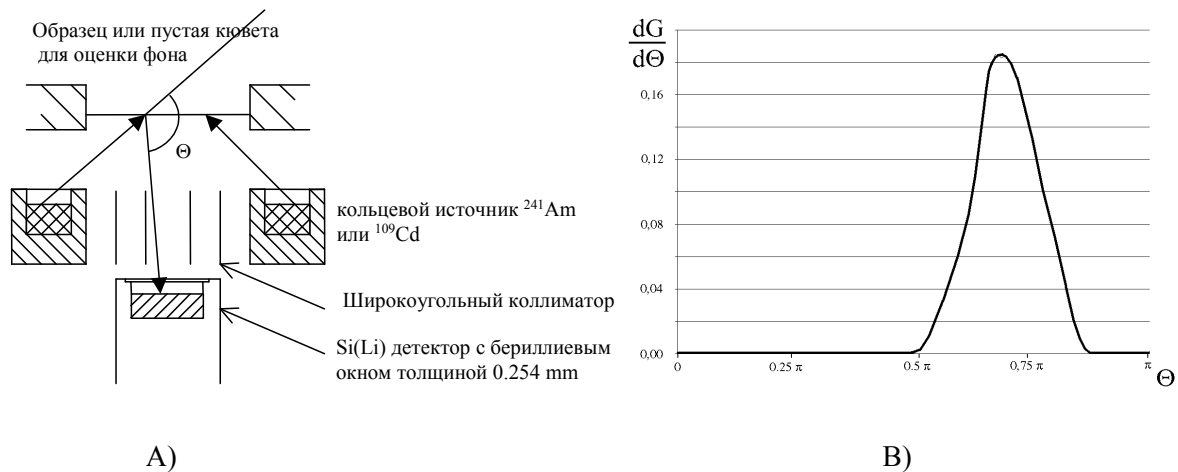


Рис. 1.9. Модель учета геометрического фактора, согласно [8].

А) модель спектрометра

В) Результаты расчета геометрического фактора

В рассмотренной модели используется аналитический расчет геометрического фактора и никак не учитываются возможные процессы многократного взаимодействия, описанные в [5, 6, 28]. При этом следует отметить, что решения данной задачи можно считать аналогичными при возбуждении флуоресценции рентгеновской трубкой, так и при использовании для этих целей радиоизотопных источников, например, ^{109}Cd или ^{241}Am .

В работе [32] вводится оценка влияния разброса углов взаимодействия в системе источник-образец-детектор, аналогичной традиционной, однако в такой модели также не учитывается процесс многократного рассеяния фотона в образце.

Общая картина многократного взаимодействия рентгеновского излучения с веществом приведена на Рис. 1.10 [29].

Задача по расчету спектров может быть сведена к расчету двух пар систем транспортных уравнений для поляризованного излучения фотонов и электронов согласно [5], но сложность этих уравнений в настоящий момент не позволяет получить полное аналитическое решение, поэтому в качестве возможного решения будет использовано моделирование методом Монте-Карло. Для разумного упрощения задачи моделирование процессов взаимодействия ограничено рассмотрением неполяризованного излучения.

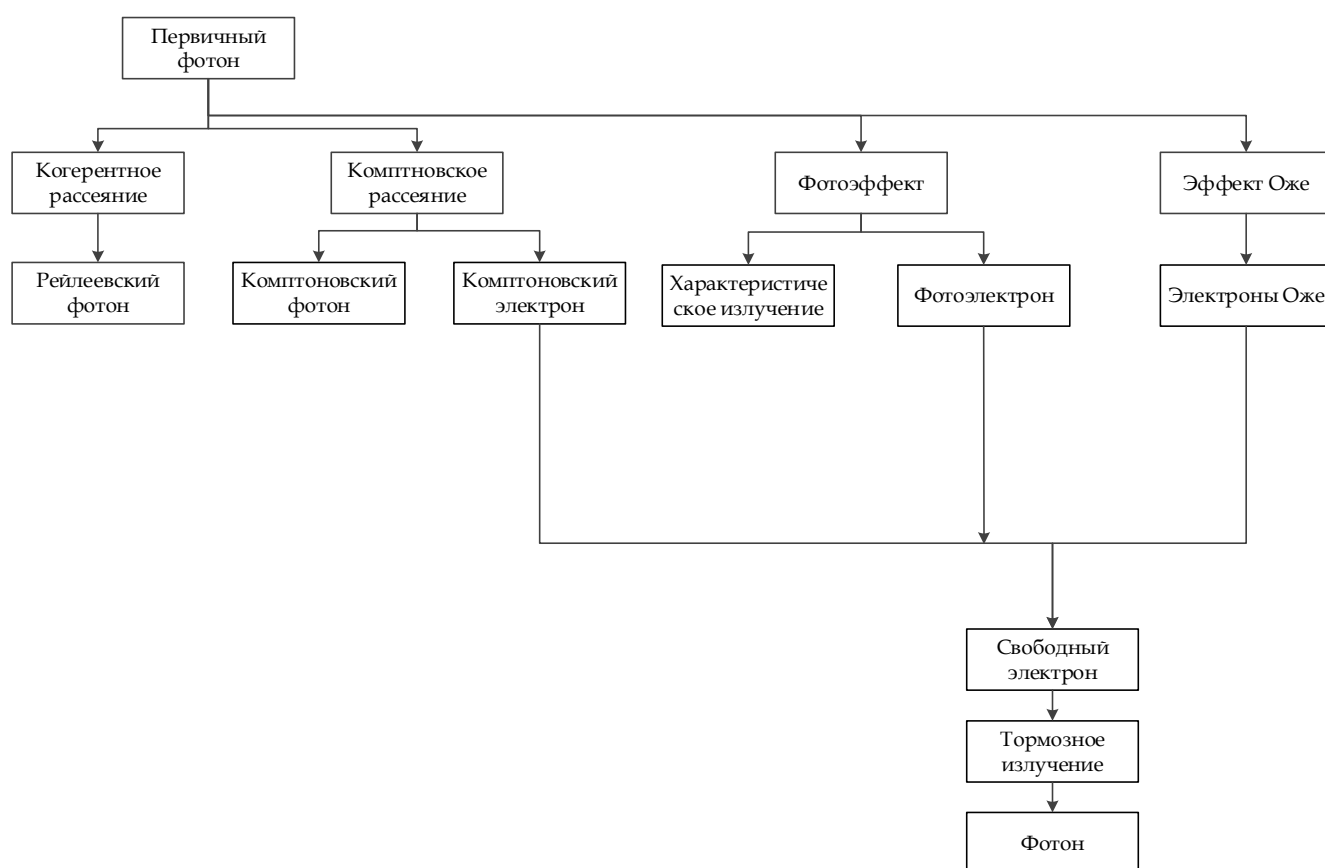


Рис. 1.10. Основной механизм взаимодействия фотонов и электронов с веществом в области рентгеновского излучения по материалам работы [5].

В рентгеновской области энергий основными процессами взаимодействия излучения с веществом являются фотопоглощение, когерентное и комптоновское рассеяние. Суммарное действие процессов поглощения и рассеяния определяет

ослабление потока рентгеновского излучения в веществе и характеризуется атомным коэффициентом ослабления:

$$\mu_a = \tau_a + \sigma_{coh} + \sigma_{incoh} \quad (1.9)$$

Изменение интенсивности пучка рентгеновского излучения в образце на пути dx определяется интенсивностью излучения I_x на глубине x , числом атомов n в единице объема вещества и вероятностью взаимодействия этого излучения с атомами, то есть атомным коэффициентом ослабления μ_a :

$dI_x = -\mu_a I_x n dx$, где $n = \rho \frac{N_A}{A}$ - число атомов в единице объема, ρ - плотность вещества. После интегрирования этого выражения и подстановки n будем иметь выражение:

$$I_x = I_0 \exp\left(-\mu_a \frac{\rho N_A}{A} x\right) \quad (1.10)$$

Величина $\mu_x = \mu_a \frac{\rho N_A}{A}$ [см⁻¹] называется линейным коэффициентом ослабления.

1.2.1 Процесс фотопоглощения

В классическом приближении процесс фотопоглощения рассматривается как взаимодействие фотона с оболочкой атома и характеризуется атомным коэффициентом истинного поглощения. Классическое приближение для его расчёта дает крайне неточный результат при достаточно правильной картине зависимости атомного коэффициента от длины волны и атомного номера поглощающего элемента [27],

В современных работах [33] рассмотрены случаи для более точного описания гамильтониана взаимодействия системы падающий фотон – электрон атома. Выражение для частичного коэффициента поглощения K оболочки атома имеет следующий вид:

$$\tau_K \cong 32\lambda \cdot r_0 \left(\frac{4}{3}\right) \left[\frac{\lambda}{\lambda_K}\right]^{\frac{5}{2}} f(\xi), \quad (1.11)$$

$$\xi = \sqrt{\frac{\lambda}{\lambda_K - \lambda}}, \quad f(\xi) = \sqrt{\frac{\lambda}{\lambda_K}} \left(\frac{e^{-4\xi \arccot \xi}}{1 - e^{-2\pi\xi}} \right), \quad \lambda_K - \text{длина волны } K\text{-края поглощения.}$$

В настоящее время для расчетов коэффициентов фотопоглощения используют аппроксимации [34, 35] в виде степенной функции $\tau = \tau_0 + \tau_1 E^{-1} + \tau_2 E^{-2} + \tau_3 E^{-3} + \tau_4 E^{-4}$,

либо в виде экспоненциальной $\mu = C\lambda^n$, где коэффициент n лежит в пределах от 2.5 до 3 [36, 37,38].

В работе [39] рассмотрена оценка неопределенности (погрешности) коэффициентов поглощения, в области 0.1 ÷ 0.5 кэВ эта неопределенность может достигать 100-200%, с ростом энергии неопределенность становится более приемлемой: 1-2% в диапазоне 5-100 кэВ. Частные случаи оценки неопределенности массовых коэффициентов поглощения для кремния и углерода в диапазоне энергий от 6 до 60 кэВ рассмотрены в работах [40,41]. Существует также ряд таблиц, содержащих расчетные и экспериментальные данные значений массовых коэффициентов, например [42,43] и другие.

1.2.2 Процесс когерентного рассеяния

Рассеяние рентгеновского излучения происходит на связанных с атомами электронах облучаемого материала. При этом существенное влияние на процесс оказывает связь рассеивающих электронов с ядром и их положение в момент рассеяния. В зависимости от соотношений энергии первичного E_j и рассеянного излучения E_s различают упругое или когерентное рассеяние, при котором $E_j \approx E_s$, и неупругое комптоновское - $E_j > E_s$ [44]. При некогерентном рассеянии возникает поток электронов отдачи, кинетическая энергия которых зависит от угла вылета.

В простейшем случае процесс рассеяния на свободном электроне рассматривается в приближении колебаний свободного электрона под действием внешнего поля, а само рассеяние – процессами переизлучения. Дифференциальное сечение когерентного рассеяния при этом описывается формулой Томпсона [45]:

$$\frac{d\sigma^T}{d\Omega} = r_0^2 (1 + \cos^2 \theta) / 2 \quad (1.12)$$

Дифференциальное сечение характеризует интенсивность когерентно рассеянного излучения под определенным углом θ к направлению распространения первичного излучения.

В современной теории взаимодействия излучения с веществом и особенности электронной оболочки используют понятие атомного форм-фактора f , представляющего собой отношение интенсивности рассеянного излучения на одноэлектронном атоме к интенсивности когерентного рассеяния свободным электроном. Для многоэлектронного атома рассчитывается атомный форм-фактор $F = \sum_{i=1}^Z f_i$, где Z -атомный номер атома.

Формула для когерентного рассеяния на атоме будет иметь следующий вид:

$$\frac{d\sigma_a^K}{d\Omega} = \frac{d\sigma^T}{d\Omega} F^2 \quad (1.13)$$

Точный расчет фактора F осуществляется на основе квантово-механических представлений методом самосогласованного поля Хартри-Фока. В литературе широко представлены результаты расчета в виде таблиц, например [46], основанные на систематизации работ [47,48,49].

Кроме того существует приближенный способ расчета атомного фактора, основанный на методе Томаса-Ферми [50], при котором существует достаточно простая зависимость: $F \approx Z(e^{-g} + 0.12)$. Величины $g = \frac{5,91}{\lambda} \sin \frac{\nu}{2} Z^{-1/3}$, где Z -атомный номер атома, ν -угол рассеяния, λ -длина волны рассеянного излучения. С точки зрения классической теории сложение собственных колебаний электронов и вынужденных их колебаний изменяет фазу результирующей волны. Искажение результирующей волны тем сильнее, чем ближе частоты вынужденных и собственных колебаний. С этим эффектом связано аномальное рассеяние в области краев поглощения рассеивающего элемента, такое рассеяние требует введения дополнительной поправки ΔF [44]. В области аномального рассеяния применяется подход к расчету дифференциальных сечений когерентного рассеяния, основанный на использовании релятивистских S -матриц, подробно рассмотренных, например, в работах [51] и др.

1.2.3 Процесс некогерентного рассеяния (эффект Комптона)

Теории некогерентного рассеяния была предложена А.Комптоном[52,53], в соответствии с корпускулярной теорией. Первичный фотон рассматривается как частица с энергией $E_j = h\nu_j$ и импульсом $p_j = h\nu_j/c$, где h –постоянна Планка; ν_j -частота электромагнитного излучения. В результате столкновения с покоящимся электроном первичный фотон передает ему часть энергии и рассеивается на некоторый угол θ . В соответствии с законами сохранения энергии и импульса энергия некогерентного рассеянного фотона определяется формулой Комптона [11]:

$$E_s^{HK} = \frac{E_j}{1 + \frac{E_j}{m_e c^2} (1 - \cos \theta)} \quad (1.14)$$

Дифференциальное сечение некогерентного рассеяния вычисляется по формуле Клейна-Нишины-Тамма, основанной на квантовой электродинамике [54]:

$$\frac{d\sigma^{KHT}}{d\Omega} = \frac{r_0^2}{2} \left(\frac{E_j - E_e}{E_j} \right)^2 \left[\left(\frac{E_j}{E_j - E_e} \right) + \left(\frac{E_j - E_e}{E_j} \right) - \sin^2 \theta \right], \quad (1.15)$$

где r_0 - классический радиус электрона, E_j и $E_j - E_e = E_s$ - энергии фотона до и после взаимодействия, θ - угол рассеяния.

Для некогерентного рассеяния на реальном атоме формула дифференциального сечения приобретет следующий вид:

$$\frac{d\sigma_a^{KHT}}{d\Omega} = \frac{d\sigma^{KHT}}{d\Omega} H, \quad (1.16)$$

где H - функция некогерентного рассеяния. Результаты нерелятивистских теоретических расчетов с использованием метода Хартри-Фока, а также экспериментальные данные для функций некогерентного рассеяния представлены в виде таблиц [46]. Данный метод расчет дает хорошо согласующийся с экспериментальными данными результат, в работе [55] рассмотрено сравнение результатов для Cu и Zn. Метод Томаса-Ферми позволяет приближенно представить величину $S(\nu) = H(\nu)/Z$ как функцию только одной переменной [44]:

$$S(\nu) = 1 - e^{-5\nu}, \quad (1.17)$$

$$\text{где } \nu = \frac{2,21}{Z^{2/3}} \frac{\sin(\nu/2)}{\lambda}.$$

Дифференциальное сечение некогерентного рассеяния может быть представлено в виде:

$$\frac{d\sigma_a^{KHT}}{d\Omega} = \frac{d\sigma^{KHT}}{d\Omega} Z [1 - e^{-5\nu}]. \quad (1.18)$$

Более правильный подход для вычисления интенсивностей некогерентного рассеяния связан с применением матриц столкновения, так называемых S-матриц. Оценка использования данного метода для рассмотрения некогерентного рассеяния приведена в работе [56]. Данные параметров расчета некогерентного рассеяния частиц с использованием релятивистских методов S-матриц приведены в работах [57,58,59,60]. Современные данные расчета массовых коэффициентов поглощения и дифференциальных сечений рассеяния когерентного и комптоновского представлены также в работе [61].

1.3 Процессы взаимодействия электронов с веществом

При ионизации атомов первичным излучением в образце возникает поток фотоэлектронов. Возврат ионизированных атомов в исходное состояние сопровождается испусканием Оже электронов. В процессе не когерентно рассеянное первичное излучение высвобождает из оболочек атомов электроны отдачи. Все эти электроны являются источниками тормозного рентгеновского излучения и вносят значимый вклад в фоновое излучение [15,27]. Другим немаловажным фактором, определяющим важность рассмотрения процессов взаимодействия электронов с веществом, является учет процессов неполного сбора заряда связанного с выходом вышеупомянутых электронов из чувствительной области детектора, что формирует значительный вклад в фоновый сигнал аппаратуры с энергетической дисперсией [8].

1.3.1 Интенсивность характеристического излучения, возбужденного потоком электронов. Характеристическое излучение рентгеновской трубки.

Вероятность ионизации i уровня атома вещества рассматривается как отношение числа атомов ионизированных пучком электронов, к числу электронов в этом пучке.

Число ионизаций dn на элементарном отрезке dx электрона в веществе равно произведению сечения Q поперечной ионизации на число атомов в единице объема:

$$dn = Q \frac{N_A \rho}{A} dx, \text{ где } \frac{N_A \rho}{A} - \text{число атомов в единице объема, } \rho - \text{плотность вещества.}$$

Поперечное сечение ионизации Q представляет сечение в пределах которого вероятность ионизации равна 100%. Выражение для Q определяется формулой Бете [27]:

$$QE_q^2 = a \frac{\ln(rU)}{U}, \quad (1.19)$$

E_q - потенциал возбуждения q - оболочки атома; $U = \frac{E}{E_q}$ - превышение энергии налетающих электронов E над потенциалом возбуждения E_q ; r - постоянная величина, которую при $U < 20$ для поперечного сечения ионизации К-уровня можно принять равной 1; $a = \pi e^4 b_q g_q$, где g_q - число электронов на q - оболочки атома, b_q - параметр ионизации q - оболочки атома, установленный экспериментально. С хорошей точностью данное значение определено для К оболочки : $b_K = 0,606$, и не зависит от атомного номера [62],

$$b_L = \frac{A}{Z - B} + C + DZ \text{ [63], где } A=2,519; B=26,6; C=-0,0968; D=0,0103;$$

Торможение электронов в веществе происходит в результате многочисленных неупругих взаимодействий с электронами внешних оболочек атома. Поэтому если предположить, что этот процесс происходит непрерывно, то полное число ионизаций на пути прохождения электрона будет равно:

$$n = \frac{N}{A} \int_x Q d(\rho x) \quad (1.20)$$

Для определения зависимости энергии электрона от пройденного им в веществе пути используется закон Томаса-Уидингтона, либо его более точная формулировка - закон Бете. В дифференциальной форме закон Томаса-Уидингтона:

$$\frac{dE}{d(\rho x)} = -\frac{b}{2E} \quad (1.21)$$

, где $b = \frac{4\pi e^4 Z \rho l N_A}{A}$, l примерно равно 6.

Формула Бете в нерелятивистском приближении имеет вид:

$$-\frac{dE}{d(\rho x)} = \frac{4\pi e^4 N_A Z}{A} \frac{1}{E} \ln\left(\frac{1166E}{J}\right), \quad (1.22)$$

где $J = 11,5Z$ – средний потенциал ионизации [эВ] определяемый формулой Блоха [64] (здесь E – в эВ). Средний потенциал ионизации имеет различные выражения, например, в работе [65] данное соотношение представлено в виде: $\frac{J}{Z} = 14[1 - e^{-0,1Z}] + \frac{75,5}{Z^{2/7,5}} - \frac{Z}{100 + Z}$, а в [66] имеет вид: $\frac{J}{Z} = 9,76 + 58,8Z^{-1,19}$.

Интенсивность характеристического излучения, возбужденного потоком электронов, получают, используя выражения для интенсивности характеристической линии рентгеновского спектра и закон Бете:

$$N_i = \frac{n_q b_q}{4\pi} \frac{1}{ZE_q} \left\{ U_0 - 1 - \frac{\ln X}{X} [Li(XU_0) - Li(X)] \right\} \omega_i p_{ij}, \quad (1.23)$$

где $X = \frac{1166E_q}{J}$, ω_i - выход рентгеновской флуоресценции, p_{ij} - вероятность радиационного перехода из состояния i в состояние j , Li - интегральная логарифмическая функция. Для учета поглощения характеристического рентгеновского излучения в веществе используется поправка, предложенная Филибертом [67]:

$$f(\chi) = \frac{1}{\left(1 + \frac{\chi}{\sigma}\right) \times \left(1 + \frac{h}{1+h} \times \frac{\chi}{\sigma}\right)} \quad (1.24)$$

где $h = 1,2 \frac{A}{Z^2}$, $\sigma = \frac{4,5 \cdot 10^5}{E_0^{1,67} - E_q^{1,67}}$, E_0 – энергия электронов падающих на образец.

Кроме широко используемой в данный момент аппроксимации Филиберта в настоящий момент существует огромное количество методов [68], но несмотря на это, не существует четких критериев выбора того или иного метода, что приводит к широкому разнообразию подходов и результатов.

Для учета обратно рассеянных электронов используют поправку [69],

$$R = 1 - \int_0^{E_0} \left(\frac{dN_e}{dE} \right) dE, \quad (1.25)$$

$$\text{где } \left(\frac{dN_e}{dE} \right) = \frac{n_0}{E_0} \Phi(E, E_0, Z);$$

$$\Phi(E, E_0) = a \left\{ 0,27 \left(\frac{E}{E_0} \right)^{0,02Z} + \left(1,1 + \frac{5}{Z} \right) \left[\left(\frac{E}{E_0} \right)^{0,1Z} - 1,1 \left(\frac{E}{E_0} \right)^{0,4Z} \right] \right\}, \quad (1.26)$$

где $a = Z \left\{ -0,00391 \ln(Z+1) + 0,00721 [\ln(Z+1)]^2 - 0,001067 [\ln(Z+1)]^3 \right\} \times F(E_0)$,

$$F(E_0) = \left(\frac{E_0}{30} \right)^{-0,25 + 0,0787 \times Z^{0,3}}, \quad E_0 \text{ – энергия электронов падающих на образец}$$

Согласно работе [70] для учета избирательного возбуждения атомов мишени пучком электронов используется поправка Δ , а полная вероятность возбуждения будет иметь вид:

$$F'_i = F_i(1 + \Delta),$$

где $\Delta = 0,82 \times 10^{-5} Z^2 r_q \frac{E_q}{n_q b_q}$, $r_q = (S_q - 1) / S_q$, S_q – скачок поглощения.

Отсюда интенсивность характеристического излучения будет иметь вид, с учетом понятия средней энергии, согласно работе [71]:

$$N_i = \left[\frac{g_q b_q}{24\pi} \frac{1}{Z \ln X} (U_0 \ln U_0 - U_0 + 1) \omega_i p_{i,j} \right] (1 + \Delta) R_i f(\chi) \quad (1.27)$$

[фотон/(электрон*стерадиан*с)],

где $X = \frac{1,166 \cdot E}{J}$, $\bar{E} = \frac{E_0 + 2E}{3}$ – средняя энергия пучка электронов

1.3.2 Тормозное излучение электронов.

Согласно современным теоретическим представлениям тормозное излучение, возникающее в процессе рассеяния заряженной частицы на мишени (атоме или ионе) формируется двумя процессами:

- обычное тормозное излучение - испускание фотонов осуществляется в статическом поле мишени;

- поляризационное тормозное излучение – фотоны излучаются не рассеиваемой частицей, а электронами мишени, вследствие динамической поляризации налетающей частицей [72]. В отличие от обычного тормозного излучения электроны мишени рассматриваются как динамическая система с некоторыми степенями свободы.

Распределение обычного тормозного излучения хорошо описывается теорией Бете-Гайтлера и Заутера[73]. Они описали торможение электрона в кулоновском поле в рамках квантовой электродинамики: электрон описывался с помощью свободного уравнения Дирака и взаимодействие электрона с ядром учитывалось в рамках Борновского приближения. В частном случае в расчетах рентгенофлуоресцентного анализа используется квазиклассическое приближение для тормозного излучения заряженных частиц [74]. Согласно этому приближению тормозное излучение возникает в результате торможения заряженных частиц в кулоновском поле ядра. Оно характеризуется сплошным или непрерывным спектром излучения с коротковолновой границей $\lambda_0 = \frac{hc}{e V_0}$, где V_0 -ускоряющее напряжение. Эта минимальная длина волны соответствует превращению максимальной энергии электронов в излучение при однократном столкновении с ядром.

Теория формирования неоднородного излучения была предложена Крамерсом[75]. Вероятность взаимодействия описывается выражением для дифференциального сечения возбуждения тормозного излучения :

$$\sigma(E) = \frac{16\pi^2 e^2}{3\sqrt{3}mc^3} \cdot \frac{Z^2}{E} = const \cdot \frac{Z^2}{E} \quad (1.28)$$

Интенсивность тормозного излучения, возбужденного электроном с энергией E на пути ds в образце, равна произведению толщины слоя, пройденного электроном, на число атомов в единице объема $\frac{\rho N_A}{A}$ и на поперечное сечение возбуждения $\sigma(E)$:

$$dI = \frac{N_A}{A} \sigma(E) d(\rho s) \quad (1.29)$$

Для массивной мишени отсюда можно получить выражение для интенсивности тормозного излучения, используя формулу Томаса-Уидингтона:

$$I = k_E Z(E_0 - E), \text{ где } k_E = \frac{8\pi}{3\sqrt{3}} \cdot \frac{1}{mc^3 e^2 l \rho}, \text{ с учетом того, что } E = hc/\lambda, \text{ получают}$$

известную формулу Крамерса для тормозного излучения:

$$N_\lambda = I_\lambda \frac{\lambda}{hc} = k_\lambda \frac{1}{hc} Z \frac{(\lambda - \lambda_0)}{\lambda_0 \lambda^2}, \quad (1.30)$$

$$\text{где } k_\lambda = \frac{8\pi}{3\sqrt{3}} \cdot \frac{h^2}{mc e^2 l \rho}.$$

При использовании закона Бете формула для тормозного излучения с учетом обратно рассеянных электронов и поправки на поглощение Филибера примет следующий вид [76]:

$$N_\lambda = \frac{13,65 \times 10^{-6}}{4\pi L} Z \frac{(\lambda - \lambda_0)}{\lambda_0 \lambda^2} Rf(\chi) \quad (1.31)$$

где $T = \pi / \sqrt{3}$, λ - длина волны тормозного излучения, λ_e - коротковолновая граница тормозного спектра, соответствующая энергии E_e электрона, Z - атомный номер элемента, формирующего образец, $L = \ln\left(\frac{11662E_e + E}{J}\right)$, J - средний потенциал ионизации $J = 11,5 \cdot Z$.

Другая модификация формулы, учитывающие спектральное распределение тормозного излучения тонкой мишени, предложенная Зоммерфельдом, представлена в работе [77] и заключается в добавлении множителя $B(\lambda) \approx \lambda^a$, где a - показатель, зависящий от материала (например, для Al = 0.26, для Cr = 0.18 и т.д.).

В работе [70] предлагается подходящий масштабирующий коэффициент, оставляющий неизменной спектральную интенсивность в области максимума, при котором $B(\lambda) = \left(\frac{\lambda}{2\lambda_0}\right)^a$ и выражение для интенсивности тормозного спектра имеет следующий вид:

$$N_\lambda = \frac{13,65 \times 10^{-6}}{4\pi L} Z \frac{(\lambda - \lambda_0)}{\lambda_0 \lambda^2} B(\lambda) Rf(\chi) \quad (1.32)$$

Согласно последним исследованиям, в ряде случаев в практически значимом диапазоне энергий низкоэнергетического рентгеновского излучения, ультрафиолетового и диапазона видимого излучения поляризационные эффекты становятся значимыми по сравнению с обычным тормозным излучением [78].

Прямое наблюдение поляризационного тормозного излучения было впервые осуществлено в ультрамягкой рентгеновской области 70-220 эВ при рассеянии электронов с энергией 0.6 кэВ на атомах инертных газов (Xe) [79,80]. Для генерации электромагнитного излучения использовался специфичный газоструйный метод генерации электромагнитного излучения и уникальная низкотемпературная установка [81]. Согласно этой работе в районе 80-155 эВ наблюдается скачок тормозного излучения, обусловленный поляризационными эффектами. Примерное соотношение обычного тормозного излучения и поляризационного в этом случае 0.5.

1.4 Источники первичного рентгеновского излучения.

Структура сигнала и фона рентгеновской флуоресценции в значительной мере зависит от условий возбуждения и спектра первичного излучения источника.

В рамках нашей работы будут рассмотрены радиоизотопные источники рентгеновского излучения и рентгеновские трубки.

1.4.1 Радиоизотопные источники рентгеновского излучения (^{241}Am , ^{109}Cd)

Рентгеновское излучение в радиоактивных источниках возникает при возбуждении атомов элементов потоком электронов, альфа-частиц или гамма-квантов, при котором происходит выброс электронов с электронных оболочек атома. При этом возможны три варианта возникновения рентгеновского излучения [82]:

- внутренняя конверсия или захват атомным ядром электрона К- оболочки с последующим испусканием характеристического К - излучения; излучение таких источников не содержит тормозной составляющей спектра при высокой интенсивности; обычно источники характеризуются небольшим периодом полураспада;

- взаимодействие β - излучения с атомами вещества, приводящее к возникновению тормозного и характеристического рентгеновского излучения;

- рентгеновское излучение, сопровождающее α - распад.

Список основных радиоизотопных источников рентгеновского излучения приведен, например, в работе [82] (см. Таблица 1.1)

Таблица 1.1. Характеристики радиоизотопных источников рентгеновского излучения.

Изотоп	Период полураспада	Энергии излучения, кэВ	Выход, %/Бк
^{55}Fe	2,9 года	5.9	26
^{57}Co	270 суток	6.4; 14.4; 122; 136	51; 9; 85; 11
^{109}Cd	470 суток	22.1; 88	107; 4
^{119}Sn	250 суток	25.2; 23.8	100; 100
^{153}Gd	236 суток	41.5; 70; 97; 103	110; 3; 30; 20
^{170}Tm	129 суток	52.3; 84	100; 3
^{241}Am	458 лет	14-18; 59.6; 26.4	37; 36; 3

1.4.2 Рентгеновские трубки

Современные рентгеновские трубки – это электровакуумные приборы, предназначенные для генерации рентгеновского излучения. Рентгеновское излучение возникает при торможении ускоренных электронов на материале анода, изготовленного из металла (например, вольфрама). Высокое напряжение может быть приложено к катоду (отрицательная полярность), или к аноду трубки (положительная полярность) [27], при заземлении анода или катода и окна рентгеновской трубки соответственно.

1.4.2.1 Модель рентгеновской трубки с заземленным анодом

Спектральное распределение интенсивности излучения рентгеновской трубки можно представить в виде [27]:

$$N_i(\lambda) = \left[I_\lambda + \sum_i \delta(\lambda - \lambda_i) \times I_i \right] W_a, \quad (1.33)$$

где функция W_a , описывает поглощение излучения входным бериллиевым окном рентгеновской трубки:

$$W_a = e^{-\mu_{Be} \cdot \rho_{Be} \cdot d_{Be}}$$

$$\mu_{Be} = 0,35 \cdot \lambda^{2,86};$$

$\delta(\lambda - \lambda_i)$ - функция, принимающая значение 1 при $\lambda = \lambda_i$ и значение 0 при всех прочих λ .

Для описания спектра тормозного излучения используется формула Крамерса с коррекцией на поглощение в аноде и окне трубки в работе^[70]:

$$dN(\lambda) = 7,52 \cdot 10^{-5} \cdot Z \cdot \left(\frac{1}{\lambda_0} - \frac{1}{\lambda} \right) \frac{1}{\lambda} B(\lambda) \frac{T}{L} f(\chi) R \frac{1}{4\pi} W_a d\lambda \quad (1.34)$$

Для характеристического излучения интенсивность излучения равна:

$$N_i = \left[\frac{g_q b_q}{24\pi} \frac{1}{Z \ln X} (U_0 \ln U_0 - U_0 + 1) \omega_i p_{i,j} \right] (1 + \Delta) R_i f(\chi) W_a \quad (1.35)$$

Вычисляемые по данным расчетным формулам интенсивности тормозного и характеристического спектра дают погрешность порядка 30 %. Погрешность соотношения суммарной интенсивности характеристического излучения к интенсивности тормозного излучения рентгеновской трубки для К-серии составляет порядка 10 %. [70·83].

В работе [84], кроме расчетов тормозной и характеристической составляющей на основе формулы Крамерса, используется моделирование методом Монте-Карло. Приведенные расчеты и сопоставление их с экспериментальными данными дает ошибку порядка 4% в частном случае на линии *SiLa*.

1.4.2.2 Модель рентгеновской трубки с заземленным катодом.

В отличие от рентгеновских трубок с заземленным анодом, высокий потенциал анода трубки с заземленным катодом приводит к тому, что часть рассеянных электронов возвращается обратно, предотвращая разрушение выходного бериллиевого окна. Соотношение числа обратно рассеянных электронов к числу электронов катодного пучка может достигать 50%, вклад этого эффекта приводит к изменению интенсивности тормозного и характеристического излучения такой трубки[85·86].

Для расчетов [87] используют расчетную формулу спектральной интенсивности излучения рентгеновской трубки с заземленным анодом представленную в работе [70].

Интенсивность рентгеновского излучения, обусловленного возвратом обратно рассеянных электронов, рассчитывается как интеграл выражения $N_1(\lambda, E_0, Z)$ по энергиям этих электронов с учетом их распределения $\frac{dn}{dE}$:

$$N_1(\lambda, E_0, Z) = \int_{E_\lambda}^{E_0} N(\lambda, E, Z) \cdot \frac{dn}{dE} \cdot dE, \quad (1.36)$$

где E_λ - энергия, соответствующая длине волны λ , E - энергия обратнорассеянных электронов в диапазоне dE .

В [87,88] представлены энергетические распределения обратнорассеянных электронов в виде:

$$\frac{dn}{dE} = \frac{n_0}{E_0} \left[\Phi(E, E_0, Z) + \int_E^{E_0} \frac{1}{E_1} \Phi(E_1, E_0, Z) \Phi(E, E_1, Z) dE_1 \right], \quad (1.37)$$

В работе [87] произведено сопоставление расчетных и экспериментальных данных для рентгеновской трубки с заземленным катодом.

1.5 Детекторы рентгеновского излучения

Детекторы рентгеновского излучения преобразуют квант энергии рентгеновского фотона в материале детектора в электрический сигнал (обычно импульс тока).

Взаимодействие рентгеновских лучей в детекторе определяется такими же процессами, что и в образце: фотоэлектрический эффект, комптоновское и когерентное рассеяние. Так же следует отметить [89], что при росте энергии регистрируемого фотона наблюдается рост вклада комптоновского рассеяния.

Существует два основных типа детекторов, разделяющихся по способу преобразования энергии первичного фотона в электрический заряд: прямого действия, такие как *полупроводниковые детекторы* и *газонаполненные пропорциональные счетчики*, и не прямого действия детекторы, в которых происходит ступенчатое преобразование, например, *сцинтилляционные счетчики*, в которых первичный рентгеновский фотон преобразуется в поток оптического излучения, которое с помощью фотоумножителя преобразуется в поток электронов.

В большинстве случаев полученный в процессе взаимодействия электрический заряд пропорционален энергии падающего первичного фотона^[24]:

$$Q = E/\varepsilon, \quad (1.38)$$

где ε -коэффициент пропорциональности, определяемый типом преобразования энергии первичного фотона в электрический заряд, то есть для образования носителя

заряда первичный фотон тратит ϵ энергии. Типичное значение этого параметра для аргонового пропорционального счетчика равно 26 эВ, для кремниевого полупроводникового детектора – 3.6 эВ. Следует отметить, что приведенная формула описывает учет только процессов полного поглощения, а процессы, при которых поглощается только часть энергии фотонов, приводящая к образованию фона, опускаются.

Для детекторов ионизирующего излучения, где эффект регистрации связан с фотоэлектрическим поглощением, эффективность определяется по фотопику как:

$$\chi = 1 - e^{-\mu \rho d / \sin \varphi}, \quad (1.39)$$

где ρ - плотность вещества детектора, $d/\sin\varphi$ - толщина детектора по направлению падающего излучения, μ - линейный коэффициент поглощения. Основные ограничения оценки эффективности по пику фотопоглощения: а) при энергиях более 100 кэВ доминирующим процессом становится процесс комптоновского рассеяния; б) выход электронов из чувствительной области детектора.

В области малых энергий (от 0.1 до 1 кэВ) основным фактором ограничивающим эффективность детекторов является процесс поглощения падающего излучения во входном окне детектора, но использование современных материалов для входных окон детектора позволяет значительно улучшить эффективность. Другой важный фактор – это наличие *мертвого слоя*, где заряд, возникающий в процессе взаимодействия фотона с веществом детектора «собирается» не полностью.

Энергетическое разрешение спектрометрической системы (детектор вместе с электроникой) определяет возможность разрешения падающих фотонов с близкими значениями энергиями. При поглощении частиц с одинаковой энергией амплитуда импульса на выходе детектора может меняться от события к событию, то есть в набранном спектре линия (которая для идеального детектора представляла бы δ - функцию) оказывается размытой. В качестве характеристики энергетического разрешения детектора используются полная ширина линии на половине высоты (ПШПВ), отнесённые к медиане линии и выраженные в процентах:

$$R = E_{FWHM} / E_0. \quad (1.40)$$

1.5.1 Пропорциональные газовые детекторы рентгеновского излучения

Существует два основных типа газовых детекторов: газовые пропорциональные счетчики (включающие в себя многопроволочные пропорциональные камеры – MWGC) и комбинированные газовые пропорциональные сцинтилляционные счетчики [90].

Пропорциональные газовые детекторы получили широкое распространение в современной рентгеновской аппаратуре и наиболее часто применяется в диапазоне энергий до 10 кэВ [91]. Эти детекторы представляют из себя контейнер цилиндрической формы с подключенным к его внешней поверхности катодом и проводника в виде нити, натянутой вдоль оси цилиндра, на которую подана положительная разность потенциалов. Внутренний объем заполнен инертным газом, обычно аргоном, неоном или ксеноном. Электроны, возникающие в процессе ионизации атомов газа рентгеновскими фотонами, под действием соответствующей разности потенциалов приобретают энергию, достаточную для ионизации молекул газа вблизи нити. При этом выбирается режим, при котором ионизация пропорциональна энергии падающего в детектор фотона, поэтому такой счетчик называется пропорциональным [91]. В пропорциональном режиме возникающие электроны при вторичной ионизации создают лавинный разряд, который собирается на электродах детектора. В таких условиях заряд возникающий на электродах в M раз больше заряда при единичной ионизации. Коэффициент M называется коэффициентом газового усиления, типичное значение которого лежит в пределах от 10 до 10^4 .

Газовые пропорциональные сцинтилляционные детекторы рентгеновского излучения (GPSC) нашли широкое применение в рентгеновской спектрометрии. В отличие от пропорциональных детекторов, в GPSC в процессе ионизации высокоэнергетическим фотоном испускается фотон с энергией видимого спектра, который вызывает вторичную сцинтилляцию, либо люминесценцию. Сигнал формируется в фотосенсоре и пропорционален энергии падающих в детектор фотонов [92].

1.5.2 Сцинтилляционный детектор рентгеновского излучения

Сцинтилляторы — вещества, обладающие способностью излучать свет при поглощении ионизирующего излучения. Как правило, излучаемое количество фотонов

для данного типа излучения приблизительно пропорционально поглощённой энергии, что позволяет получать энергетические спектры излучения. В сцинтилляционном детекторе свет, излученный при сцинтилляции, собирается на фотоприёмнике (как правило, это фотокатод фотоэлектронного умножителя — ФЭУ), преобразуется в импульс тока, усиливается и регистрируется той или иной системой.

Сцинтилляторы бывают твердые, жидкие и газообразные. По сравнению с газовыми детекторами сцинтилляторы основаны на материалах с большим атомным номером Z , а также большей плотностью, т.е. более эффективно поглощают высокоэнергетические первичные фотоны. Они также обладают неплохим энергетическим разрешением, а также высокой временной разрешающей способностью [91,93,94,95].

1.5.3 Полупроводниковые детекторы рентгеновского излучения

Полупроводниковые детекторы (ППД) по назначению, составу и устройству относятся к твердотельным детекторам ионизирующего излучения [96,97]. Ионизирующая частица, попавшая в детектор, производит пары электрон-дырка, которые собираются электрическим полем, приложенным к электродам детектора. Величина соответствующего электрического импульса пропорциональна энергии, потерянной частицей или γ -квантом в детекторе [98].

Физические процессы, протекающие в детекторе, могут быть описаны следующим образом. При взаимодействии рентгеновского излучения с материалом детектора за счет фото-, Оже- и комптоновского эффектов образуются вторичные электроны с энергией достаточной для начала ударной ионизации. Через очень малый промежуток времени $\sim 10^{-13}$ с энергия вторичных электронов уменьшается до порога образования пар носителей зарядов. Средняя энергия, затрачиваемая на образование пар электронов и дырок составляет 2.96 эВ в Ge, 3.66 эВ в Si, 4.6 эВ в CdTe [24,99,100].

При приложении внешнего электрического поля образованные неравновесные заряды притягиваются к соответствующим электродам, что приводит к импульсу тока. Флуктуации собственного тока при отсутствии носителей заряда, могут быть соизмеримы с регистрируемым сигналом при наличии в ограниченном количестве ловушек, которые снижают эффективность. Наличие собственных носителей зарядов накладывает серьезные ограничения на использование полупроводниковых детекторов: требуется высокая степень химической чистоты материалов и геометрической упорядоченности

кристаллической решетки. При снижении температуры детектора экспоненциально снижается количество собственных носителей заряда. При температурах жидкого азота кремний и германий имеют высокое удельное сопротивление.

По типу используемой проводимости, особенностям чувствительного слоя полупроводниковые детекторы (ППД) делят [25] на ППД с электронно-дырочными переходами и ППД проводящего типа. Различают два основных типа электронно-дырочных ППД $p-n$ типа и $p-i-n$ типа. Среди детекторов $p-n$ типа наибольшее распространение получили поверхностно-барьерные детекторы и диффузионные с чувствительной областью, созданной в результате диффузии соответствующих примесей в полупроводниковом материале [89].

Для увеличения энергетического разрешения, а также возможности увеличения обратного напряжения, в детекторах, основанных на $p-n$ - переходе создают дополнительную область протяженностью 3-5 мм, лишенную собственных носителей заряда (i -область собственной проводимости), которая находится между двух областей n и p . Это реализуемо с помощью использования эффекта Пела, который состоит в дрейфе ионов лития в поле $p-n$ перехода, а также компенсации свободных носителей заряда глубокими уровнями посредством создания радиационных дефектов. Из-за высокой подвижности лития в полупроводниках, такие детекторы необходимо постоянно содержать при низких температурах для сохранения их эксплуатационных характеристик. Примером такого типа детекторов является один из самых распространенных в рентгеновской спектроскопии - Si(Li) детектор. Типичное энергетическое разрешение коммерчески используемых кремниевых детекторов порядка 135 эВ на энергии 5.9 кэВ.

Полупроводниковые детекторы имеют ряд существенных преимуществ перед пропорциональными газовыми детекторами и сцинтилляторами:

1. Энергия, необходимая для получения одной пары носителей в детекторе, значительно меньше, чем в газах, поэтому число образовавшихся пар в детекторе больше и оно менее подвержено статистическим флуктуациям.

2. Плотность материала полупроводникового детектора значительно выше, чем плотность газов. Поэтому твердотельные детекторы могут использоваться регистрации и γ - и рентгеновских квантов, а также частиц высоких энергий.

3. Время нарастания электрического импульса в детекторах значительно меньше, чем в ионизационных камерах [101].

1.5.3.1 Комбинированные детекторы

В качестве возможных путей улучшения характеристик полупроводниковых детекторов используется путь комбинирования детекторов или создания детекторов с периодическими структурами [102].

Работа [103] посвящена композитному полупроводниковому детектору гамма излучения высоких энергий на базе Ge(Li). Детектирующая система представляет собой два детектора из германия (P-I-N), которые могут быть выполнены на одном кристалле в виде структуры N-I-P-I-N. Для каждой группы детекторов в составе кристалла используется своя счетная аппаратура. Аппаратура спектрометра позволяет суммировать импульсы от обеих частей детектора, а также запрещать импульсы при регистрации событий, возникающих при многократном комптоновском рассеянии гамма-квантов, что приводит к улучшению соотношения пик/фон.

В работе [104] рассмотрен детектор гамма излучения состоящий из двух детекторов: ближнего (детектор 1) к источнику ионизирующего излучения – с малым атомным номером и дальнего (детектор 2) – значительно большего объема с большим атомным номером. Поверхности обоих детекторов совмещены. Гамма излучение ослабляется сначала детектором 1 с образованием пар электрон-дырка и затем полностью поглощается веществом детектора 2. Использование такой схемы, согласно работе, должно позволить одинаково эффективно детектировать фотоны большой и малой энергии. Но данная схема имеет ряд недостатков, связанных с тем, что процесс взаимодействия фотонов с веществом имеет случайный характер, и фотон может быть поглощен случайным образом, либо областью первого детектора, либо второго детектора. Процессы полного поглощения в разных областях такого детектора будут давать импульсы различной амплитуды, что делает почти невозможным использование данной схемы в спектрометрии.

Известен так же спектрометр гамма и рентгеновского излучения на базе пары полупроводниковых детекторов с различными атомными номерами и разной толщиной чувствительной области [105]. Два детектора из Si(Li) и Ge(Li) расположены параллельно, их толщины подбираются так, чтобы вклад «горба потерь» имел одинаковую интенсивность от обоих детекторов. Аппаратура спектрометра позволяет

производить счет отдельно по каждому из детекторов, а результирующий спектр представляет собой разность между спектрами обоих детекторов. Данная схема позволяет снизить фон, связанный с комптоновским рассеянием в детекторе.

В патенте [106] рассмотрен полупроводниковый прибор, состоящий из двух совмещенных планарных диодов. С помощью диода, ближайшего к источнику излучения, происходит детектирование рентгеновского и альфа-излучения, а высокоэнергетические гамма-кванты детектируются диодом, дальним от источника. Никакой дополнительной обработки сигналов с обоих диодов патентом не рассматривается.

Для улучшения энергетического разрешения в работе [107] предложено использование детектора с двумя разделенными зонами, к которым приложены различные электрические потенциалы, относительно одной общей точки. Сигнал от обеих частей детектора усиливается и обрабатывается электроникой. Описание способов и особенностей работы детектора в качестве спектрометрического прибора в патенте не рассмотрено.

Обзор этих работ показал возможные технические пути улучшения детекторов, но без какого-либо рассмотрения физических процессов, происходящих в такого рода системах и их влияния на получаемый ими сигнал.

1.5.3.2 Функция отклика полупроводниковых детекторов

Функция отклика детектора F определяет вероятность появления сигнала A при регистрации фотона с энергией E . Истинный спектр рентгеновского излучения $N(E)$ преобразуется за счет функции отклика детектора $F(E, A)$ в спектр сигналов $N(A)$:

$$N(A) = \int F(E, A)N(E)dE . \quad (1.41)$$

Функция отклика является отражением физических процессов регистрации рентгеновского излучения и состоит из следующих компонентов: нормального распределения основного фотопика, комптоновского распределения некогерентно рассеянных квантов и пиков вылета детектора, флуктуации сбора носителей, шумы электроники, флуктуации фона и энергетической калибровки. Процесс формирования спектра представлен схематично на рис. 1.1, который отражает последовательность протекающих процессов при спектрометрии ионизирующего излучения [101].

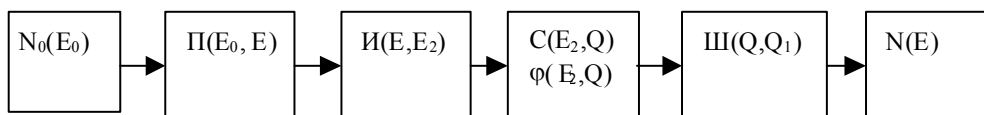


Рис. 1.11. Схема формирования амплитудного спектра

$N_0(E_0)$ – исходный спектр,

$П(E_0, E)$ – спектр, поглощенный веществом детектора,

$И(E, E_2)$ - вклад статистического характера ионизации,

$С(E_2, Q)$ – вклад неполного сбора заряда детектором,

$φ(E, Q)$ - флуктуации потерь заряда,

$Ш(Q, Q_1)$ – размытие сигнала шумами регистрирующей аппаратуры,

$N(E)$ - результирующий спектр.

Для исследования функции отклика детектора используют различные методы, такие как метод Монте-Карло [108,109,110], модели, основанные на решении транспортных уравнений [5], а также аналитические приближения.

В простейшем случае элементы функции отклика детектора могут быть представлены в виде суммы простых аналитических [111,112,113] (а также см Рис. 1.12):

$$F(E) = G(E) + ESC(E) + T(E) + S(E) + TS(E) \quad (1.42)$$

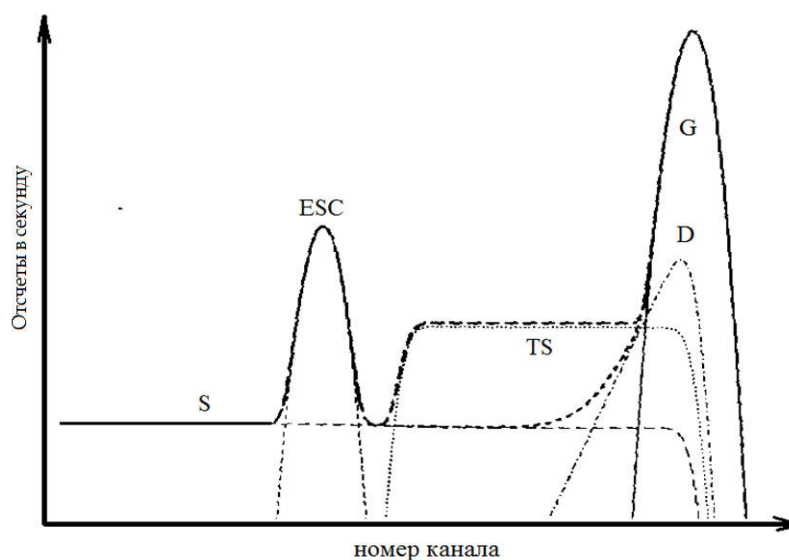


Рис. 1.12. Вид функции отклика детектора для полупроводникового детектора рентгеновского излучения согласно работам [111,113,114]]. G - пик полного поглощения , ESC - пик потерь детектора , S - вклад функции отклика детектора, связанный с выходом электронов из чувствительной области детектора; TS - область связанная с наличием «мертвого» слоя полупроводникового детектора,

В случае полного поглощения энергии фотона в детекторе он будет зарегистрирован в *пике полного поглощения* с формой, которую можно описать выражением:

$$G(E) = A \exp\left(-\frac{[E - E_0]^2}{2\sigma^2}\right), \quad (1.43)$$

где E_0 - энергия фотона, попадающего в детектор.

В процессе фотопоглощения с последующим выходом флуоресцентного фотона — образуется пик К-фото-потерь; положение пика фото-потерь определяется разностью энергий регистрируемого излучения и энергии флуоресцентного кванта вещества детектора. Пики вылета могут иметь сложную структуру, связанную с наличием нескольких линий в K -спектре рентгеновского излучения. Это приводит к снижению эффективности по фотопику, что проявляется на кривых эффективности скачкообразным провалом на K -краях [24]. Форма фотопика будет описываться следующим выражением:

$$ESC(E) = \sum_{k=1}^g A \exp\left(-\frac{[E - E_{0,k}]^2}{2\sigma^2}\right), \quad (1.44)$$

где g - индекс линии K серии материала детектора, $E_{0,k}$ - значение энергии излучения этих линий .

В случае выхода электрона высокой энергии из чувствительной области детектора фотон может быть зарегистрирован в хвосте с энергией от 0 до E_0 и описывается функцией:

$$S(E) = \frac{1}{2} H_s \operatorname{erfc}\left[\frac{E - E_0}{\sqrt{2}\sigma}\right];$$

В случае регистрации фотона внутри мертвого слоя детектора, описываемого функцией $TS(E)$, вклад может иметь скачок в районе половины энергии регистрируемого сигнала, связанный с краевыми эффектами и технологическими дефектами детектора, $T(E)$. Следует отметить, что в [114] не рассматривается процесс регистрации фотонов после комптоновского взаимодействия, связанного с процессом возникновения и выхода высокоэнергетических фотонов из чувствительной области детектора, а также тормозного излучения комптоновских электронов.

В работе [93] рассмотрен вклад в функцию отклика детектора неполного сбора заряда, связанного наличием приповерхностного «мертвого слоя», где заряд собирается не полностью, вследствие более интенсивной, чем в основном объеме детектора, рекомбинации носителей, которая объясняется наличием приповерхностных дефектов полупроводника. При таких процессах количество собранного заряда электронов и дырок уменьшается на некоторую величину. Задача измерения «мертвого слоя» [115,116] является важной в спектрометрии излучения заряженных частиц. В зависимости от технологических особенностей изготовления и температуры среды толщина мертвого слоя Si(Li) детектора может варьировать в пределах как 300-500 мкм [117], так и 20-40 мкм [118]. По современным оценкам толщина мертвого слоя может быть вплоть до 0.1 – 0.2 мкм [119].

Для оценки толщины частично активного слоя используется информация об отношении амплитуды основного пика функции отклика детектора к хвостам, связанным с неполным сбором заряда [120].

Следует отметить, что учет «мертвого» слоя детектора является важным при моделировании функции отклика детектора.

При вылете рассеянного фотона из чувствительной зоны детектора в случае некогерентного рассеяния, первичный фотон будет зарегистрирован в плато или горбе потерь с энергией от 0 до максимальной энергии электронов отдачи (см. Рис. 1.13).

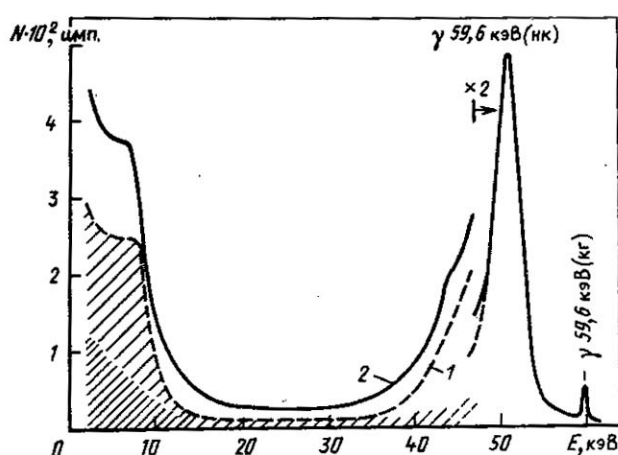


Рис. 1.13. Аппаратурный спектр рассеянного излучения ^{241}Am при диаметре коллимационного канала 2 (1) и 12 (2) мм. Частой штриховкой выполнена зарядовая, а редкой - комптоновская часть функции отклика ППД [24].

В условиях РФА границы комптоновского рассеяния наблюдаются при доминировании не полностью поглощаемого излучения в детекторе. При использовании Si(Li) детекторов фон, связанный с некогерентным рассеянием, начинает играть роль при энергиях падающего в детектор излучения порядка 30-40 кэВ [121,122]. Согласно [24] наличие комптоновского распределения серьезно ограничивает использование полупроводниковых детекторов. Следует отметить, что с ростом атомного номера материала детектора, интенсивность комптоновского рассеяния становится менее значимой, но из-за многократных процессов рассеяния граница этого распределения носит размытый характер. Комптоновское рассеяние с учетом рассеяния для материалов, применяемых в детекторах, подробно рассмотрено в работе [123]. Аналитическая оценка комптоновского спектра связана с учетом функции S некогерентного рассеяния, и в приближении однократного рассеяния выражение будет иметь вид [24]:

$$N_K \approx \frac{d\sigma_s^{KHT}(\theta, E)}{2\mu \left[1 - \exp\left(\frac{-2\mu\rho d}{\sin(\varphi)}\right) \right]}, \quad (1.45)$$

где $d\sigma_s^{KHT}(\theta, E)$ - дифференциальное сечение некогерентного рассеяния, μ - массовый коэффициент ослабления, θ - угол комптоновского рассеяния. Это приближение имеет существенное ограничение, связанное с обрывом спектра со стороны малых энергий, тогда как без учета связи электронов в атоме комптоновское распределение в низкоэнергетической части максимально. Возможно вместо пика фотопоглощения для калибровки полупроводникового детектора следует использовать комптоновский пик (плато). Так, в работе [124] говорится о достаточно хорошем согласии расчетных и экспериментальных данных по оценке распределения комптоновского спектра при использовании радиоактивных источников ^{241}Am и ^{99}Tc , но остальные компоненты функции отклика детектора в данной работе не рассматриваются. В работах [109,110,111] функция отклика детектора рассматривается при энергиях падающего в детектор излучения в диапазоне до 20 кэВ, где «горб потерь» не существен.

Результаты анализа функции отклика детектора в диапазоне энергии от 2 до 200 кэВ для Si(Li) и сверхчистого HPGe детекторов приведены в работе [125], в которой рассмотрены особенности функции отклика детектора, связанные с выходом электронов

к поверхности, позволяющие объяснить наличие указанных выше структур функции отклика детектора. Аппроксимация функции отклика детектора выведена на основании расчетов программы HyperMet.

Еще одним фактором, влияющим на форму функции отклика детектора, является поглощение флуоресцентного излучения входным окном детектора. Влияние различных типов входных окон на функцию отклика детектора рассмотрено в работе [126].

1.6 Использование метода Монте-Карло для моделирования процессов взаимодействия и расчетов рентгеновских спектров

Метод Монте-Карло — общее название группы численных методов, основанных на получении большого числа реализаций стохастического (случайного) процесса, который формируется таким образом, чтобы его вероятностные характеристики совпадали с аналогичными величинами решаемой задачи. Данный метод может быть применен для оценки интегралов, характеризующих решение транспортных уравнений. Для расчетов функции отклика детектора, наряду с решением транспортных уравнений [127], существует большое число программных реализаций метода Монте-Карло [128·129], таких как PENELOPE, FLUKA, GEANT, MCNP и другие.

При решении задач моделирования методом Монте-Карло сложный вероятностный процесс взаимодействия частицы с веществом рассматривается как последовательность элементарных актов, при этом конкретные значения параметров определяются из соответствующих распределений с помощью случайных чисел [130]. Вероятность возникновения события X характеризуется функцией плотности вероятности $f(u)$ определенной на некотором интервале $[x_{\min}, x_{\max}]$ в виде функции распределения

$$F(X) = \int_{x_{\min}}^X f(u) du \in [0,1], \text{ при этом } \int_{x_{\min}}^{x_{\max}} f(u) du = 1.$$

Значения функции распределения $F(X)$ является некоторым случайным числом $R \in [0,1]$. Переопределяют функцию распределения через новую функцию $g(v)$, для которой $\int_0^1 g(v) dv = 1$:

$$F(X) = \int_{x_{\min}}^X f(u) du = R = \int_0^R g(v) dv, \quad (1.46)$$

Следует отметить, что интеграл функции $g(v)$ равен случайной величине R из прямоугольного распределения, как оно обычно представлено в современных вычислительных устройствах:

$$g(R) = \begin{cases} 1 & \text{if } 0 < R \leq 1 \\ 0 & \text{else} \end{cases} . \quad (1.47)$$

Отсюда случайное событие X будет представлено в виде обратной функции распределения:

$$X = F^{-1}(R) \quad (1.48)$$

т.е. выборка события X , оценивается обратной функцией распределения вероятностей на случайно выбранные позиции R .

В силу статистической эквивалентности вычислительный процесс можно считать имитационным моделированием процесса взаимодействия частиц с веществом. Необходимые характеристики такого взаимодействия пучка частиц с веществом при таком моделировании получают путем обработки большой совокупности историй событий с количеством примерно от 10^3 до 10^6 .

Метод Монте-Карло используется для определения качественного и количественного состава исследуемого образца, используя методику MCLLS (Monte-Carlo Library Least Squares) [131]. Согласно этому методу измеренный экспериментально спектр представляется линейной комбинацией спектров, рассчитанных заранее, методом Монте-Карло. С помощью метода наименьших квадратов производится оценка вкладов каждого из элементов. Данный метод позволяет быстро и достаточно точно определить концентрации и элементный состав, при этом отсутствуют недостатки, связанные с наложением пиков и взаимным влиянием компонентов друг на друга.

Цели и задачи работы

Целью работы является изучение физических процессов определяющих формирование фона при рентгенофлуоресцентном анализе, совершенствование существующих моделей формирования фона и поиск возможных решений, улучшающих соотношения сигнал/фон.

Для достижения цели необходимо решить следующие задачи:

1. Оценить теоретически и экспериментально вклад тормозного излучения фото-, Оже и комптоновских электронов в интенсивность фонового излучения в длинноволновой области спектра флуоресценции в спектрометрах с волновой дисперсией;

2. Уточнить физико-математическую модель детектора энергодисперсионного спектрометра с учетом неполного сбора заряда в приповерхностном «мертвом» слое, оценить толщину, при которой вклад процессов, связанных с неполным сбором заряда, будет соизмерим со вкладом, обусловленным выходом вторичных электронов из рабочего объема детектора;

3. Оценить предельное соотношение сигнал/фон, которое может быть обеспечено спектрометрами с энергетической дисперсией при учете толщины и материала полупроводникового детектора. Предложить возможные конструктивные решения, которые позволят улучшить соотношение сигнал/фон для аппаратуры с энергетической дисперсией;

4. Разработать физико-математическую модель энергодисперсионного спектрометра с радиоизотопным источником возбуждения для расчета амплитудного спектра с учетом процессов многократного взаимодействия рассеянного и флуоресцентно излучения в образце, а также геометрических особенностей конструкции спектрометра.

Глава 2. Роль тормозного излучения фото, Оже и комптоновских электронов в формировании фона в аппаратуре с волновой дисперсией.

2.1 Моделирование вклада тормозного излучения фото -, Оже и Комптоновских электронов.

2.1.1 Тормозное излучение свободных электронов

При ионизации атомов первичным излучением в образце возникает поток фотоэлектронов. Возвращение ионизированных атомов в исходное состояние сопровождается появлением Оже электронов. Кроме того, при некогерентном рассеянии первичного излучения из оболочек атомов выбиваются электроны отдачи или Комптоновские электроны. Все выше перечисленные электроны назовем свободными электронами. Они являются источниками тормозного рентгеновского излучения [27] формирующего фон.

Спектральная интенсивность (выраженная числом фотонов, приходящихся в единицу времени на единицу площади, нормальной к направлению распространения пучка) для некоторого элемента i в массивном образце при неоднородном первичном излучении может быть представлена [16] в виде:

$$\frac{dN}{d\lambda} = K(\lambda) \int_{\lambda_0}^{\lambda} \frac{N(\lambda_1) \theta(\lambda_1, \lambda) d\lambda_1}{\frac{\mu(\lambda_1)}{\sin\varphi} + \frac{\mu(\lambda)}{\sin\psi}}, \quad (2.1)$$

где $\theta(\lambda_1, \lambda)$ - вероятность преобразования энергии первичного фотона с длиной волны λ_1 в фотон тормозного излучения свободного электрона с длиной волны λ ;

$\mu(\lambda_1)$ и $\mu(\lambda)$ - массовые коэффициенты ослабления образцом первичного и тормозного излучения;

φ и ψ - углы падения на образец первичного и отбора тормозного излучения, соответственно;

$N(\lambda_1)$ -количество фотонов первичного излучения.

Данное уравнение справедливо в предположении, что пробег свободного электрона до момента его взаимодействия с возникновением фотона тормозного рентгеновского

излучения много меньше расстояния, проходимого в образце возникшим фотоном. Следовательно можно предполагать, что точка возникновения тормозного излучения совпадает с точкой появления свободного электрона, и поэтому вероятность $\theta(\lambda_1, \lambda)$ можно представить в виде произведения:

$$\theta(\lambda_1, \lambda) = \theta(\lambda_1, E_e) \cdot \theta(E_e, \lambda), \quad (2.2)$$

где $\theta(\lambda_1, E_e)$ - вероятность преобразования первичного фотона с длиной волны λ_1 в свободный электрон с энергией E_e ; $\theta(E_e, \lambda)$ – вероятность преобразования свободного электрона с энергией E_e в фотон тормозного излучения с длиной волны λ . (Эта вероятность не зависит от процесса возникновения электрона и определяется спектральным распределением его тормозного излучения).

Вероятности появления $\theta(\lambda_1, E_e)$ и энергия E_e определяется конкретным процессом возникновения фото-, Оже и Комптоновских электронов.

Вероятность появления фотоэлектронов $\theta_{ph}^i(\lambda_1, E_e)$ для q – оболочки некоторого элемента i определяется частичным коэффициентом поглощения первичного излучения

$\theta_{ph}^i(\lambda_1, E_e) = \tau_{qi}(\lambda_1)$, с учетом возможности ионизации нескольких оболочек:

$\theta_{ph}^i(\lambda_1, E_e) = \sum_q \tau_{qi}(\lambda_1)$. Для многокомпонентного образца отдельные вероятности

суммируются по всем его элементам:

$$\theta_{ph}(\lambda_1, E_e) = \sum_i C_i \sum_q \tau_{qi}(\lambda_1), \quad (2.3)$$

где C_i – содержание элемента i в образце.

Отсюда выражение для тормозного излучения фотоэлектронов можно записать в виде:

$$\frac{dN_{ph}}{d\lambda} = K_i \cdot N_1(\lambda_1) \cdot \frac{7.52 \cdot 10^{-5} \cdot Z_{eff}}{\frac{\mu(\lambda)}{\sin \varphi} + \frac{\mu(\lambda_1)}{\sin \psi}} \cdot \sum_i C_i \sum_q \tau_{qi}(\lambda_1) \cdot \left(\frac{1}{\lambda_{qi}} - \frac{1}{\lambda} \right) \cdot \frac{1}{\lambda} \cdot B(\lambda) \cdot \frac{T}{L}, \quad (2.4)$$

где $Z_{eff} = \sum_i C_i Z_i$ - эффективный атомный номер флуоресцирующего образца.

Для электронов Оже вероятность $\theta_{Auger}^i(\lambda_1, E_e)$ для q – оболочки элемента i определяется произведением $\tau_{qi}(\lambda_1)$ на вероятность безрадиационного перехода $(1 - \omega_{qi})$, где ω_{qi} – выход рентгеновской флуоресценции элемента i , и на вероятность Π_{qi} появления некоторой группы Оже переходов в их q –серии:

$$\theta_{Auger}^i(\lambda_1, E_e) = \tau_{qi}(\lambda_1) \cdot \Pi_{qi} \cdot (1 - \omega_{qi}) \quad (2.5)$$

Согласно [27] при рассмотрении Оже электронов К – оболочки можно принять, что для группы переходов KLL всех элементов образца вероятность Π_{KLL} будет примерно составлять 70%, а для остальных – 30%. Следовательно, после суммирования по всем элементам, формирующим образец, для KLL – переходов получаем[17]:

$$\theta_{Auger}^{KLL}(\lambda_1, E_e) = 0.7 \times \sum_i C_i \tau_{Ki}(\lambda_1) (1 - \omega_{Ki}), \quad (2.6)$$

и для остальных переходов, принятых за KLM:

$$\theta_{Auger}^{KLM}(\lambda_1, E_e) = 0.3 \times \sum_i C_i \tau_{Ki}(\lambda_1) (1 - \omega_{Ki}), \quad (2.7)$$

Отсюда можно записать:

$$\begin{aligned} \frac{dN_{Auger}}{d\lambda} = & K(\lambda) \cdot 7.52 \cdot 10^{-5} \cdot T \cdot \frac{1}{\lambda} Z_{eff} \cdot \sum_i C_i \int_{\lambda_0}^{\lambda} \frac{N(\lambda_1) \cdot \tau_{Ki}(\lambda_1) \cdot (1 - \omega_{Ki})}{\frac{\mu(\lambda_1)}{\sin\varphi} + \frac{\mu(\lambda)}{\sin\psi}} \times \\ & \times \left[0.7 \cdot \left(\frac{1}{\lambda_i^{KLL}} - \frac{1}{\lambda} \right) + 0.3 \left(\frac{1}{\lambda_i^{KLM}} \right) \right] \cdot \frac{B(\lambda)}{L} d\lambda_1 \end{aligned} \quad (2.8)$$

, где λ_i^{KLL} и λ_i^{KLM} -длины волн, соответствующие энергии KLL- и KLM – Оже переходов элемента i .

Вероятность возникновения комптоновских электронов[132] определяется вероятностью процесса некогерентного рассеяния первичного фотона с длиной волны λ_1 в направлении Ω , при котором он приобретает энергию E_e . Данная вероятность определяется атомным дифференциальным сечением некогерентного рассеяния, как произведение дифференциального электронного коэффициента рассеяния $\frac{d\sigma^{KHT}}{d\Omega}$ на атомный форм-фактор S:

$$\theta_c(\lambda_1, E_e) = \frac{d\sigma^{KHT}}{d\Omega} \cdot S \cdot (2\pi \sin \vartheta) \cdot \left(\frac{1}{dE_e/d\Omega} \right), \quad (2.9)$$

Дифференциальный электронный коэффициент рассеяния в соотношении определяется формулой Клейна – Нишины – Тамма (1.15).

Наличие в формуле члена $(2\pi \sin \vartheta)$ показывает, на то что электроны с одинаковой энергией образуют в пространстве конус с углом ϑ в вершине. Наличие множителя

$\left(\frac{1}{dE_e/d\Omega} \right)$ в формуле определяется необходимость преобразования угловой зависимости

дифференциального коэффициента рассеяния в энергетическую:

$$\left(\frac{1}{dE_e/d\Omega} \right) = \frac{1}{E_1 \cdot k \cdot \left(\frac{1}{1 + k \cdot (1 - \cos(\vartheta))} - \frac{k \cdot (1 - \cos(\vartheta))}{(1 + k \cdot (1 - \cos(\vartheta)))^2} \right)} \quad (2.10)$$

В отличие от фото- и Оже электронов, энергия Комптоновских электронов зависит не только от энергии первичном излучения, но и угла ϑ . Следовательно, для получения полной вероятности появления тормозных фотонов в интервале энергий от E до $E + \Delta E$ необходимо проинтегрировать уравнение по всем возможным энергиям этих электронов.

Для многокомпонентного образца выражение будет иметь вид[17]:

$$\frac{dN_C}{dE} = K_i \cdot N_1 \cdot \frac{7.52 \cdot 10^{-5} \cdot Z_{eff}}{\frac{\mu(E_1)}{\sin \varphi} + \frac{\mu(E)}{\sin \psi}} \cdot \sum_i C_i \int_E^{E_{max i}} \theta(E_1, E_{ei})(E_{ei} - E) \cdot B(E) \cdot \frac{T}{L} dE_e, \quad (2.11)$$

где $E_{max i}$ – максимальная энергия Комптоновских электронов элемента i .

Вероятность $\theta(E_1, E_e)$ в уравнении (2.11) определяется зависимостью (2.9) в которой длина волны λ_1 первичного излучения заменена соотношением $\lambda_1 = \frac{hc}{E_1}$.

Переход от энергетического распределения к распределению по длинам волн осуществляется по формуле:

$$\frac{dN_C}{d\lambda} = \frac{dN_C}{dE} \cdot \frac{hc}{\lambda^2}. \quad (2.12)$$

Спектральное распределение для полного вклада свободных электронов может быть записано в виде:

$$\frac{dN_{\text{общ}}}{d\lambda} = \frac{dN_C}{d\lambda} + \frac{dN_{\text{Auger}}}{d\lambda} + \frac{dN_{\text{Ph}}}{d\lambda}. \quad (2.13)$$

2.1.2 Оценка вкладов компонентов тормозного излучения свободных электронов в фоновый сигнал и его соотношение с рассеянным первичным излучением

На Рис. 2.1 рассмотрено соотношение рассеянного на магниевом образце ($Z=12$) первичного излучения от рентгеновской трубки с Rh ($Z=45$) анодом и суммарного тормозного излучения фото-, Оже и Комптоновских электронов [133]. Для расчета спектра первичного излучения использовалось соотношение (1.34) и (1.35), для рассеянного первичного излучения - (1.13) и (1.18).

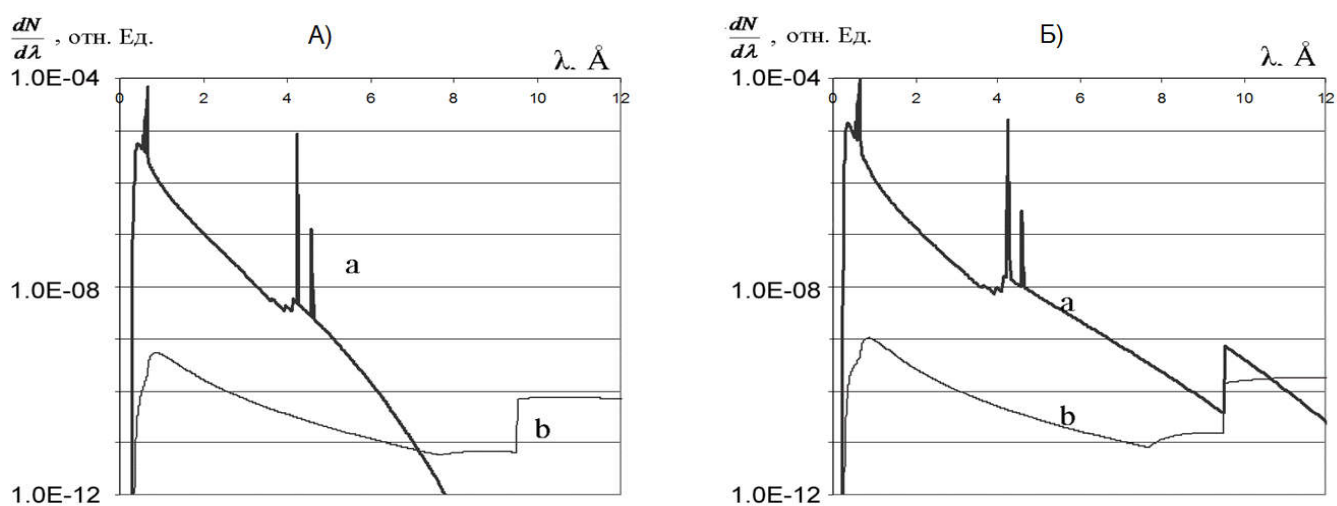


Рис. 2.1. Спектр первичного излучения рентгеновской трубки, рассеянного на магниевом образце (а), и тормозного спектра свободных электронов(б) при толщине бериллиевого окна 300 мкм (А) и 75 мкм (Б)

Из рис 2.1 следует: при некоторой длине волны вклад рассеянного тормозного излучения рентгеновской трубки становится незначительным по сравнению с вкладом тормозного излучения свободных электронов (расчетные значения интенсивностей компонентов отнесены к интенсивности тормозного излучения фотоэлектронов). Для толщины бериллиевого окна рентгеновской трубки 300 мкм это происходит при длинах

волн порядка 6 – 7 Å (область $K\alpha$ - линии фосфора и кремния). Для толщины окна 75 мкм – при длинах волн 10 – 11 Å (область $K\alpha$ – линий магния и натрия).

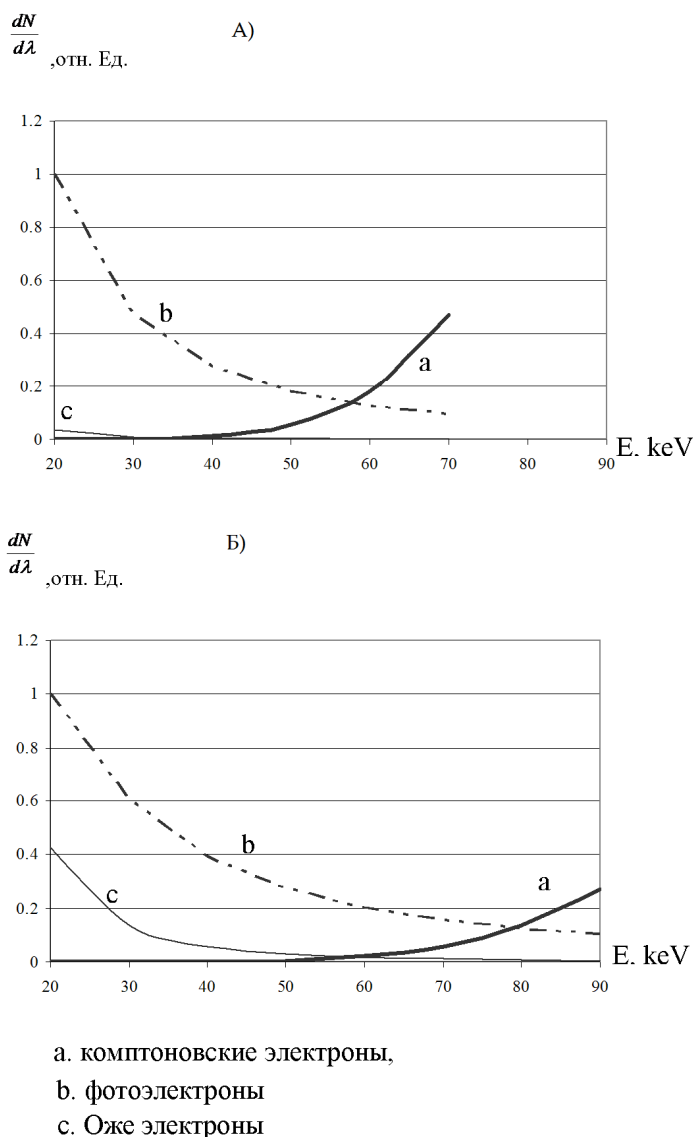


Рис. 2.2. Вклад фото-, Оже и комптоновских электронов в формирование интенсивности тормозного излучения в области $NaK\alpha$ - линии ($\lambda=11.9$ Å) для алюминиевого (А) и медного (Б) образцов как функция энергии первичных фотонов.

На рис 2.2 отражено влияние энергии фотонов первичного излучения на интенсивность тормозного спектра фото-, Оже и комптоновских электронов в области $NaK\alpha$ - линии для алюминиевого и медного образцов. Показано, что соотношение вкладов существенно зависит от элементного состава образца. Например, при энергии первичных фотонов менее 60 кэВ вклад тормозного излучения комптоновских электронов

становится незначительным, следовательно в реальном диапазоне напряжений рентгеновских трубок им можно пренебречь.

На рис. 2.3 представлено сравнение спектрального распределения тормозного излучения фото- и Оже электронов натриевого образца при возбуждении монохроматическим источником первичного излучения с энергией 20 кэВ и при возбуждении тормозной составляющей излучения рентгеновской трубки, работающей при напряжении 40 кэВ. Интенсивности спектральных распределений совмещены по максимумам длины волны 1.24 Å.

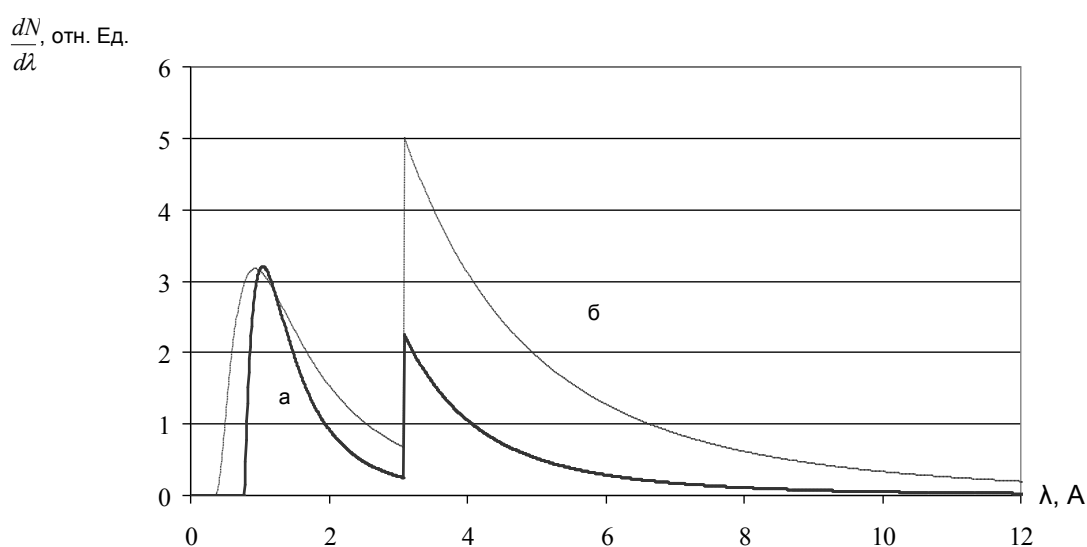


Рис. 2.3. Спектральное распределение тормозного излучения свободных электронов при облучении Са образца монохроматическим излучением с энергией 20 кэВ (а) и рентгеновской трубки с Rh - анодом при напряжении 40 кВ (K_{α} линия Rh 20.2 кэВ) (б). Максимумы тормозного излучения при 1,24 Å совмещены.

Данные этого рисунка свидетельствуют о том, что вклад длинноволновой составляющей тормозного излучения при возбуждении полихроматическим источником значительно превышает таковой для монохроматического, при этом максимум рассматриваемого спектрального распределения становится более широким.

При рассмотрении образцов содержащих несколько компонент, суммарный вклад в формирование тормозного спектра будет определяться каждым из элементов, составляющих образец, при этом полученное спектральное распределение будет иметь

сложную структуру. На рис. 2.4 представлено спектральное распределение тормозного излучения фото- и Оже электронов для ряда образцов [134].

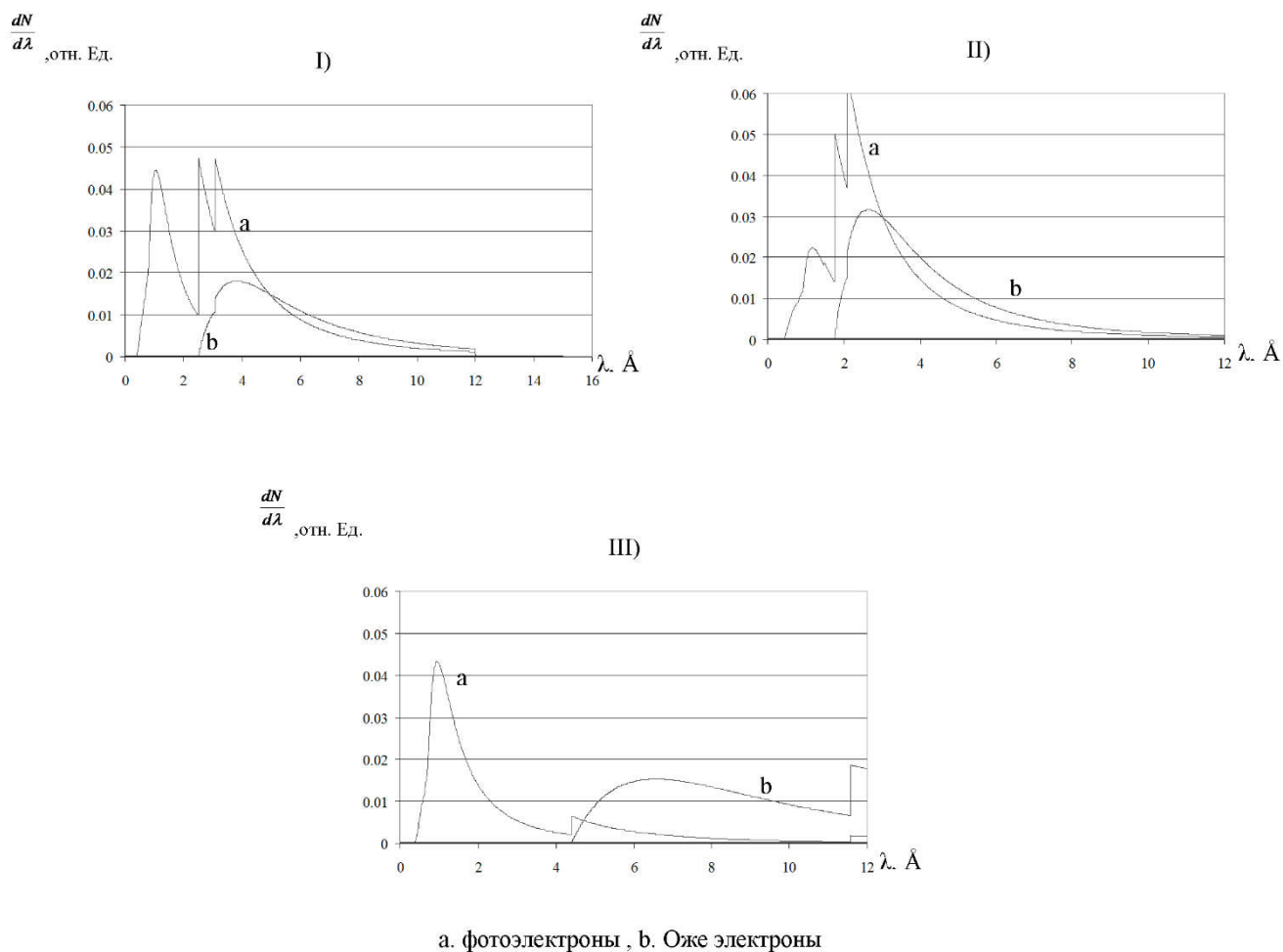


Рис. 2.4.Спектральное распределение тормозного излучения фото- и Оже электронов при облучении некоторых образцов излучением рентгеновской трубки (Rh, U = 40 кВ).

- I)** – Смесь (Ti 90%, Ca 10%).
- II)** – Легированная сталь (Fe 80%, Cr 15%, Ni 5%).
- III)** – Поваренная соль (Na 40%, Cl 60%).

2.2 Экспериментальная оценка вклада тормозного излучения свободных электронов.

В соответствии с предложенной в [4] моделью формирования фонового сигнала в аппаратуре с волновой дисперсией рассмотрим следующие уравнение:

$$\Phi = a_0 + a_{el}N_{el} + a_{fl}N_{fl} + a_dN_d + \sum_{i=1}^n a_i \frac{\sigma(\lambda_i)}{\mu(\lambda_i)} \quad (2.14)$$

Это регрессионное уравнение формирования фона, соответствует зависимости (1.1). В данном выражении N_{el} - интенсивность фона, связанная с тормозным излучением фото-, Оже и Комптоновских электронов; N_{fl} - интенсивность, обусловленная флуоресценцией кристалла-анализатора; N_d - интенсивность, связанная с диффузным рассеянием кристалла-анализатора; сумма величин $\frac{\sigma(\lambda_i)}{\mu(\lambda_i)}$ определяет наличие в фоновом сигнале вклада высших порядков отражения рассеянного первичного излучения; свободный член a_0 добавлен для учета таких не учитываемых теорией факторов, как излучение частей спектро-метра, возможные шумы аппаратуры, естественный радиационный фон и др.

Если рассматривать уравнение (2.14), как связывающее экспериментальную величину фона Φ с расчетными значениями переменных N_{el} , N_{fl} , N_d и $\sigma(\lambda_i) / \mu(\lambda_i)$, то для его практического использования необходимо определить величины коэффициентов a_0 , a_{el} , a_{fl} , a_d и a_i . Эти величины могут быть найдены регрессионным методом с использованием сведений об экспериментальных интенсивностях фона для набора образцов, не содержащих определяемый элемент (фоновые образцы). После нахождения величин названных коэффициентов можно установить значимость отдельных процессов в формировании фона для области $\text{NaK}\alpha$ -линии. В том числе, определить вклад фото- и Оже электронов в возникновение фонового излучения [135].

Рассмотрим вклад каждого фактора более подробно.

2.2.1 Вклад отражения кристалл-анализатором рассеянного излучения высших порядков

Длинноволновое первичное излучение в зависимости толщины выходного окна рентгеновской трубки должно практически полностью поглощаться. Следовательно, в области линии $\text{NaK}\alpha$, первый порядок отражения первичного излучения, рассеянного на образце, должен отсутствовать, но более коротковолновое первичное излучение других порядков отражения может оказать заметное влияние на величину фона.

Суммарная интенсивность фонового излучения, связанная с наличием высших порядков отражения первичного излучения, определяется как:

$$N_{p\lambda} = \sum_{i=1}^n a_i N_i, \quad (2.15)$$

где a_i - коэффициенты трансформации детектором интенсивности i - тых порядков отражения и их длинноволновых «хвостов» в формировании фоновой составляющей. Интенсивности N_i определяются [136] рассеянием на атомах анализируемого образца участков полихроматического первичного излучения с длиной волны λ_i :

$$N_i \approx \text{Const} \times \frac{\sigma(\lambda_i)}{\mu(\lambda_i)}, \quad (2.16)$$

где Const включает в себя спектральную интенсивность первичного излучения. Массовые коэффициенты рассеяния $\sigma(\lambda_i)$ и ослабления $\mu(\lambda_i)$ являются функцией элементного состава флуоресцирующего объекта.

Величины отношений $\frac{\sigma(\lambda_i)}{\mu(\lambda_i)}$ для некоторых образцов (первых трех порядков отражения) приведены в табл. 2.1.

Таблица 2.1. Величины $\frac{\sigma(\lambda_i)}{\mu(\lambda_i)} \times 1000$ для набора фоновых образцов в 1 – 3 порядках отражения кристалл-анализатора, настроенного на регистрацию NaK_α – излучения с длиной волны 11.91 Å.

Образец	SiO ₂	Si	S	TiO ₂	Cr ₂ O ₃	Fe	Ni	Cu	Se	MoO ₃	
$\lambda_i, \text{Å}$	11.91	0.53	1.67	1.38	0.47	0.45	0.46	0.41	0.36	0.25	0.93
	5.95	0.87	0.63	7.18	2.81	2.64	2.60	2.38	2.20	1.51	5.62
	3.97	2.32	1.63	1.35	7.09	7.03	6.60	6.33	5.74	3.82	2.72

2.2.2 Вклад флуоресценции кристалла-анализатора

Вклад флуоресценции кристалла-анализатора будем считать обусловленным только характеристическим флуоресцентным излучением облучаемого объекта. При этом интенсивность N_{fl} рентгеновской флуоресценции кристалла - анализатора определяется [4, 137], как

$$N_{fl} = Const_{fl} \times \sum_i N_i \frac{\tau_{kr}(\lambda_i)}{\mu_{kr}(\lambda_i) + n\mu_{kr}(\lambda_{fl})}, \quad (2.17)$$

где $Const_{fl}$ - величина, определяемая только характеристиками флуоресцирующего кристалла-анализатора; N_i – интенсивность (число фотонов в единицу времени) флуоресцентной линии элемента i , входящего в состав анализируемого образца; $\tau_{kr}(\lambda_i)$ – массовый коэффициент истинного поглощения излучения элемента i (с длиной волны λ_i) фонового образца атомами флуоресцирующего элемента кристалла-анализатора; $\mu_{kr}(\lambda_i)$ и $\mu_{kr}(\lambda_{fl})$ – массовые коэффициенты ослабления кристаллом - анализатором излучения элемента i анализируемого объекта и излучения флуоресцирующего элемента этого кристалла соответственно; $n = \frac{\sin \varphi}{\sin \psi}$ - отношение синусов углов падения излучения пробы на кристалл – анализатор и выхода из него собственного флуоресцентного излучения (в дальнейшем принимается, что $n = 1$.)

Суммирование в (2.17) ведется для облучаемого образца по элементам, флуоресценция которых способна возбудить флуоресценцию атомов кристалл - анализатора.

Интенсивности N_i флуоресцентного излучения образца в случае полихроматического первичного излучения могут быть рассчитаны по формулам работы [138].

В длинноволновой области для выделения флуоресцентного излучения с $\lambda > \lambda_{MgK\alpha}$ используются кристалл-анализаторы *TiAP*, *RbAP* или многослойные псевдокристаллы [137]. Флуоресценция кристаллов *TiAP* и *RbAP* характеризуется излучением с длинами волн $\lambda = 7.32 \text{ \AA}$ (*RbL\alpha*) и $\lambda = 6.97 \text{ \AA}$ (*TiM\zeta_1*) [137]. Это излучение может быть зафиксировано амплитудным анализатором, настроенным на регистрацию флуоресцентной *NaK\alpha* - линии с длиной волны 11.9 \AA . Результаты расчетов представлены в табл. 2.2.

Таблица 2.2. Интенсивности N_{fl} (условные единицы) флуоресценции кристалла-анализатора *RbAP*, которая участвует в формировании фоновой составляющей на линии *NaK\alpha*. Для удобства рассмотрения расчетные величины N_{fl} в таблице отнесены к интенсивности Fe образца.

Соединение	S	TiO ₂	Cr ₂ O ₃	Fe	Ni	Cu	Se	MoO ₃
Излучение	<i>SK\alpha</i>	<i>TiK\alpha</i>	<i>CrK\alpha</i>	<i>FeK\alpha</i>	<i>NiK\alpha</i>	<i>CuK\alpha</i>	<i>SeK\alpha</i>	<i>MoK\alpha</i> + <i>MoL\alpha</i>
N_{fl}	3.12	1.287	1.204	1.0	0.740	0.646	0.244	0.637

2.2.3 Вклад диффузного рассеяния на кристалле-анализаторе

Диффузное рассеяние определяется отклонением реальной структуры кристалла – анализатора от идеальной кристаллической решетки [14]. При отклонении рассеиваемой длины волны λ_r от длины волны λ_i , на которую настроен канал спектрометра наблюдается значительное снижение интенсивности диффузного рассеяния.

Поэтому под диффузным рассеянием будем понимать [4] обычное рассеяние кристаллом - анализатором флуоресцентного характеристического излучения, которое может быть зарегистрировано детектором, настроенным на $NaK\alpha$ -линию:

$$N_d = Const_d \sum_r N_r K(\lambda_r / \lambda_i) \frac{\sigma_d(\lambda_r)}{\mu_d(\lambda_r)} \quad (2.18)$$

где N_r – интенсивность флуоресцентного излучения фонового образца с длиной волны λ_r ; $\sigma_d(\lambda_r)$ и $\mu_d(\lambda_r)$ – массовые коэффициенты рассеяния и ослабления излучения с длиной волны λ_r в материале кристалл – анализатора, соответственно;

$K(\lambda_r / \lambda_i) = \exp\left[-\frac{(\lambda_r / \lambda_i - 1)^2}{2\Delta^2}\right]$ - некая куполообразная функция, а Δ – величина, определяющая ширину купола.

Наличие окна амплитудного анализатора можно смоделировать путем задания предельных значений для интервала величин λ_r / λ_i , за пределами которых параметр $K(\lambda_r / \lambda_i)$ становится равным нулю. Предполагается, что амплитудным анализатором регистрируется излучение с энергией варьирующейся в от $0.7(E)$ до $2.4(E)$, где E – энергия фотонов анализируемого излучения. При этом отношение λ_r / λ_i изменяется в пределах от 0.4 до 1.6. Результаты расчета параметра $K(\lambda_r / \lambda_i)$ при $\Delta = 0.3$ для флуоресцентных линий шести элементов приведены в таблице 2.3.

Таблица 2.3. Величины параметра $K(\lambda_r / \lambda_i)$ в формуле (2.18) для расчета интенсивности излучения элементов фоновых образцов, диффузно рассеянного кристалл-анализатором.

Излучение	CuLα	NiLα	SeLα	SiKα	MoL	SKα
λ_r / λ_i	1.12	1.22	0.76	0.60	0.46	0.45
$K(\lambda_r / \lambda_i)$	0.94	0.80	0.73	0.41	0.20	0.18

Подстановка величин $K(\lambda_r / \lambda_i)$, σ / μ и N_r в формулу (2.18) позволяет рассчитать интенсивность N_d характеристического излучения фоновых образцов, диффузно

рассеянного кристалл- анализатором и зарегистрированного амплитудным анализатором (см. Таблица 2.4).

Таблица 2.4. Интенсивности диффузно рассеянного на кристалл-анализаторе N_d (условные единицы) излучения фоновых образцов, регистрируемые в области $NaK\alpha$ – линии при использовании кристалла – анализатора RbAP. Условия возбуждения: рентгеновская трубка Rh (30 кВ , d_{Be} 300 мкм).

Образец	Se	Si	SiO ₂	MoO ₃	S	Cu	Ni
Излучение	SeL($\alpha+\beta$)	SiK α	SiK α	MoL($\alpha+\beta$)	SK α	CuL($\alpha+\beta$)	NiL($\alpha+\beta$)
λ_r , Å	8.99	7.13	7.13	5.41	5.37	13.3	14.5
Интенсивность N_d	0.16	0.95	0.41	0.087	0.40	0.153	0.051

2.2.4 Вклад свободных электронов

Спектральная интенсивность N_{el} тормозного излучения фото- и Оже электронов в области $NaK\alpha$ - линии для набора фоновых образцов рассчитана по формулам:

$$\frac{dN_{el}}{d\lambda} = \frac{dN_{Auger}}{d\lambda} + \frac{dN_{ph}}{d\lambda} + \frac{dN_C}{dE} \frac{dE}{d\lambda},$$

где слагаемые определяются уравнениями (2.4), (2.8) и (2.10) . На основании выводов сделанных выше, вкладом комптоновских электронов для рентгеновской трубки при напряжении 30 кВ можно пренебречь, поэтому в выражении учитываются только фото- и Оже электроны. Результаты расчета величины вклада N_{el} представлены в таблице 2.5

Таблица 2.5. Расчетные значения интенсивности N_{el} тормозного излучения фото- и Оже электронов в области $NaK\alpha$ -линии для набора фоновых образцов при использовании RbAP – кристалла-анализатора . Интенсивности отнесены к интенсивности медного образца. Условия возбуждения: рентгеновская трубка Rh (30 кВ , d_{Be} 300 мкм).

Образец	Se	Si	SiO ₂	S	TiO ₂	Cr ₂ O ₃	Ni	Cu	MoO ₃	Fe
N_{el}	3.50	1.77	0.42	2.38	0.49	0.64	1.14	1.0	0.71	1.02

2.3 Сравнение экспериментальных и расчетных данных

Сопоставим рассчитанные выше составляющие модели (2.14) с результатом эксперимента. Измерения интенсивностей для набора образцов проводились на канале Na многоканального рентгеновского спектрометра СРМ-25. Рентгеновская трубка с Rh – анодом и бериллиевым окном 300 мкм, рабочее напряжение 30 кВ. Выделение аналитической линии осуществлялось фокусирующим кристалл – анализатором RbAP (рубидиевая соль фталиевой кислоты $C_8H_4O_4Rb_2$). Следует отметить что спектрометрический канал выполнен по схеме Йогансона, что резко снижает роль диффузного рассеяния в спектрометрическом канале по сравнению с каналом выполненным по схеме Соллера. В качестве фоновых образцов использованы Se, Si, SiO_2 , S, TiO_2 , Cr_2O_3 , Ni, Cu, MoO_3 . Фоновые образцы подобраны так, чтобы можно было оценить [139, 140] влияние порядков отражения от кристалла-анализатора на формирование фона. Величины фона для области флуоресцентной $NaK\alpha$ – линии, отнесенные к интенсивности медного фонового образца, представлены в таблице 2.6.

Таблица 2.6. Измеренные интенсивности фона Φ на $NaK\alpha$. Интенсивности отнесены к интенсивности медного образца. Условия возбуждения: рентгеновская трубка Rh (30 кВ, d_{Be} 300 мкм).

Образец	Se	Si	SiO_2	S	TiO_2	Cr_2O_3	Ni	Cu	MoO_3
N_{exp}	0.84	0.60	0.32	4.31	1.38	1.42	1.19	1.00	2.22

Регрессионное уравнение (2.14) связывает экспериментальные интенсивности Φ фоновых образцов с расчетными величинами факторов, влияющих на эти интенсивности, и позволяет оценить согласие между результатами расчета и эксперимента.

Сначала оценивалась корреляция между экспериментальными интенсивностями образцов и каждым из рассмотренных выше факторов. Затем фактор с наибольшей корреляцией дополнялся каждым из оставшихся, и определялись уже два фактора, которые наилучшим образом коррелируют с функцией отклика. Таким образом определялись последующие факторы, улучшающие корреляцию. Так как отдельные

факторы могут только дополнять действие других, то отрицательное значение вклада какого-либо фактора свидетельствует о его неуместности в регрессионной модели формирования величины фона. Следует отметить, что выбор абсолютной или относительной величины фактора, влияющего на фон, определяет только величину коэффициента при этом факторе и не влияет на результаты регрессионного анализа [141].

В результате были получены две регрессионные модели, для связи экспериментальных интенсивностей фоновых образцов с расчетными значениями. Первая из представленных моделей не учитывает, а вторая учитывает влияние тормозного излучения N_e свободных электронов на формирование фона.

$$\Phi = -0.1325 + 0.3584N_2 + 0.5141N_d + 0.5386N_{fl}^{kr} \quad (2.19)$$

$$\Phi = -0.2267 + 0.3608N_2 + 0.4390N_d + 0.4893N_{fl}^{kr} + 0.1013N_e \quad (2.20)$$

Приведенные регрессионные модели свидетельствуют, что из всех порядков отражения кристаллом-анализатором рассеянного на образце первичного излучения значимым в формировании фона оказался только второй порядок (обозначен как N_2).

Экспериментальные интенсивности фоновых образцов сопоставлены с результатами расчета этой интенсивности по регрессионным моделям (2.19) и (2.20) в таблице 2.7.

Таблица 2.7. Экспериментальные и расчетные интенсивности (относительные единицы) для $NaK\alpha$. (Rh – трубка, 30 кВ, бериллиевое окно 300 мкм, кристалл-анализатор RbAP).

Фоновые образцы		Si	SiO ₂	S	TiO ₂	Cr ₂ O ₃	Ni	Cu	Se	MoO ₃
Экспериментальные и-ти		0.60	0.32	4.31	1.38	1.43	1.19	1.00	0.84	2.22
Расч. и-ти.	без учета N_e	0.59	0.40	4.26	1.54	1.43	1.10	1.07	0.62	2.26
	с учетом N_e	0.59	0.31	4.30	1.47	1.38	1.11	1.05	0.86	2.19

Статистическая обработка приведенного в табл. 2.7 числового материала показала, что в случае пренебрежения тормозным излучением свободных электронов расхождение между результатами расчета и экспериментальными данными характеризуется коэффициентом вариации, равным 12,7%. При учете этой составляющей рентгеновского фона коэффициент вариации оказался равным 4,2%, то есть уменьшился примерно в 3 раза.

Представленные регрессионные модели позволяют оценить вклады отдельных процессов в формирование рентгеновского фона. Указанные вклады, нормированные на их сумму, представлены в табл. 2.8:

Таблица 2.8. Вклады отдельных составляющих в формирование фонового сигнала для некоторых образцов: *Se*, *S*, *Si* и *TiO₂* (Rh – трубка, 30 кВ, бериллиевое окно 300 мкм, кристалл-анализатор RbAP).

Образец	Фотоэлектроны	2-ой порядок	Флуоресценция.	Диффузн. расс
Se	32.6%	50.0%	11.0%	6.4%
S	5.3%	57.1%	33.7%	3.9%
Si	21.8%	27.6%	-	50.6%
TiO ₂	2.9%	60.0%	37.1%	-

Из приведенных данных следует, что роль различных процессов в формировании фонового излучения на *NaKa* – линии существенно зависит от состава образцов, при чем роль тормозного излучения свободных электронов в отдельных случаях оказывается весьма значительной. Следует также отметить, что существенный вклад этого излучения в формирование фона для Se согласуется с наблюдаемым в Таблица 2.7 значительным сближением суммарной расчетной интенсивности фона с экспериментальной его величиной при учете рассматриваемого тормозного излучения.

2.4 Выводы по главе

Произведены теоретические расчеты и экспериментальные исследования вклада тормозного излучения фото-, Оже и комптоновских электронов рентгеновского спектра в области флуоресценции элементов с малым атомным номером ($Z \leq 11$) для аппаратуры с волновой дисперсией. Показано, что при некоторой длине волны, вклад рассеянного излучения рентгеновской трубки становится незначительным, по сравнению с вкладом свободных электронов, и зависит от толщины выходного Be окна. При толщине выходного окна 75 мкм эта граница расположена в области 10 – 11 Å. Разработана статистическая модель формирования фона, учитывавшая тормозное излучение свободных электронов. Хорошее согласие результатов расчета и эксперимента, выполненного для $NaK\alpha$ канала спектрометра СРМ-25, подтверждает значимость вклада тормозного излучения свободных электронов в процесс формирования фона, и их корреляцию с элементным составом анализируемого объекта.

Рассмотренные в данной главе исследования проводились на аппаратуре с фокусировкой по методу Иоганна, но предложенный подход может быть использован и для метода Соллера, при этом изменится только роль рассмотренных процессов в формировании фона.

Полученные результаты могут быть использованы для итеративного уточнения расчетным путем величины вклада фонового излучения фото-, Оже и комптоновских электронов в аналитический сигнал и повышения точности рентгенофлуоресцентного анализа.

Глава 3. Моделирование функции отклика полупроводниковых детекторов.

Функция отклика определяется характеристиками детектора и является отражением процессов преобразования энергии фотонов, возникающих в образце и прошедших спектрометрический тракт, в импульс тока, регистрируемый счетной аппаратурой. Флуоресцентный спектр излучения, попавший в детектор, преобразуется в амплитудный спектр со значительными искажениями, которые связаны с не идеальностью функции отклика детектора. Эти искажения дают дополнительный вклад в фоновое излучение, обусловленное следующими процессами: комптоновским рассеянием в детекторе, наличием пиков вылета, перекрытия пиков, выход вторичных электронов из чувствительной области детектора и др. Поэтому для аппаратуры с энергетической дисперсией, в отличие от кристалл-дифракционной аппаратуры, основным фактором, определяющим формирование фонового излучения, является функция отклика полупроводникового детектора.

Для описания процессов взаимодействия излучения с веществом в детекторе, образования заряда и его последующего сбора в работе нами использован метод Монте-Карло. Данный метод, в отличие от методов решения транспортных уравнений, позволяет на основе статистики поведенческого моделирования процессов, состоящих из актов поглощения, рассеяния и др., эффективно учитывать геометрические особенности детектора. При этом могут быть оценены потери энергии взаимодействия падающего излучения с атомами рабочего объема детектора, а также последствия выхода фотона высокой энергии или электрона за пределы рабочего объема детектора. Многократное повторение данных сценариев и их усреднение позволяет получить характеристики функции отклика детекторов, обусловленные указанными процессами.

Моделирование процессов в полупроводниковом детекторе крайне важно с точки зрения оценки их вклада в формирование фонового сигнала, а также возможных путей улучшения характеристик полупроводниковых детекторов и возможного снижения их влияния.

Задача моделирования была разбита на две основные части:

- 1) модификация модели формирования функции отклика детектора учетом неполного сбор заряда, связанного с наличием мертвого слоя, и оценка его вклада в формирование фоновой составляющей для аппаратуры с энергетической дисперсией;
- 2) моделирование функции отклика комбинированного двухслойного детектора и оценка его преимуществ и возможных недостатков по сравнению с обычными полупроводниковыми детекторами.

3.1 Совершенствование модели расчета функции отклика полупроводникового детектора с учетом мертвого слоя

3.1.1 Адаптация модели

Для решения задачи моделирования было разработано специализированное программное обеспечение, реализующее основные алгоритмы метода Монте-Карло. Алгоритм представляет собой моделирование процессов преобразования энергии в импульс тока в процессе взаимодействия флуоресцентных фотонов, покинувших образец и попавших в чувствительный объем детектора (блок-схема алгоритма представлена на рис 3.1).

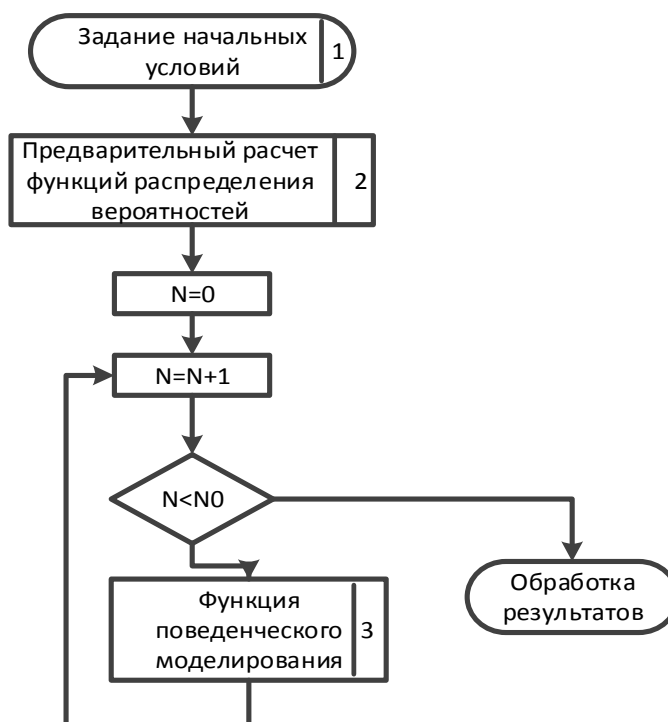


Рис. 3.1. Алгоритм расчета функции отклика детектора. Основные этапы.

Для расчета задаются следующие необходимые начальные условия: геометрические параметры детектора, материал детектора, который может быть как моноэлементным (например Si или Ge в чистом виде), так и составным (например, AsGa); толщина «мертвого» слоя (на основании экспериментальных данных существующих типов детекторов и их характеристик); толщина входного Be окна детектора 0.254 мм; количество испытаний $N\theta$, необходимых для набора статистики взаимодействия согласно методу Монте-Карло. Указывается положение точки входа в рабочий объем детектора, которое может быть фиксированным и совпадать с началом координат, либо задаваться случайно, т.е. падающий фотон может попасть в любую точку плоскости детектора, направленной к источнику излучения. Единичный вектор \vec{n} направления падения рентгеновского фотона имеет координаты либо $(0,0,1)$, либо под случайным углом. Энергия первичного фотона, попадающего в рабочий объем детектора, задается E_0 .

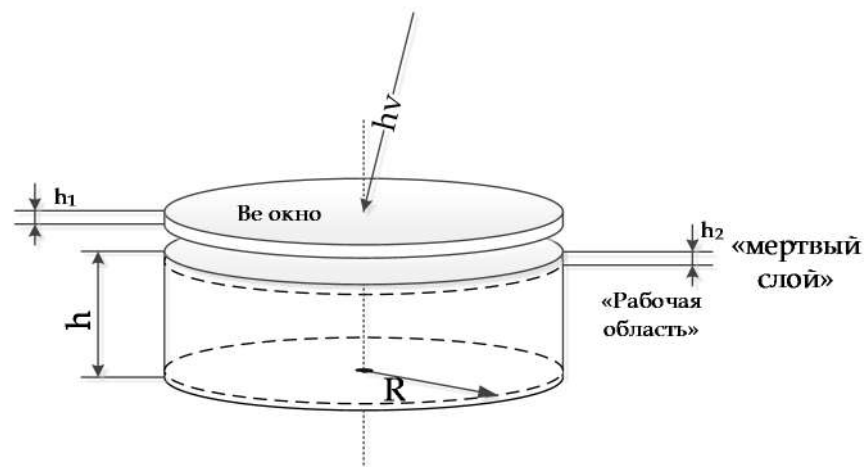


Рис. 3.2. Модель области поглощения однослойного детектора [82].

На Рис. 3.2 представлена геометрическая модель полупроводникового детектора, используемая для расчета параметров функции отклика. Модель представляет из себя цилиндрическое тело с радиусом R и высотой h . Непосредственно перед входом в детектор установлено бериллиевое окно толщиной h_1 . Параметр h_2 характеризует область приповерхностного мертвого слоя, где заряд, возникающий в процессе взаимодействия фотона с веществом детектора «собирается» не полностью [142]. При регистрации фотона внутри приповерхностного слоя фотон с учетом неполного сбора заряда будет регистрироваться с энергией:

$$E'_{out} = p_{зар}(h)(E_{det} - E_{det_out}) \quad (3.1)$$

где $p_{зар}(h)$ – функция распределения эффективности сбора заряда, собираемого в приповерхностном слое на глубине h , на которой осуществляется поглощение рентгеновского фотона и появление электронов высокой энергии. Поэтому при регистрации фотона в этой пространственной области, в дополнение к «хвосту потерь», обусловленному выходом электронов, добавляется хвост неполного сбора заряда детектора. При этом «хвост» неполного сбора заряда может иметь скачок на половине энергии регистрируемого излучения, связанный с различными параметрами «мертвого» слоя для электронов и дырок. Это может быть обусловлено какими-либо технологическими причинами, связанными с обработкой поверхности, при этом функции распределения эффективности сбора заряда разных знаков существенно отличаются.

Для моделирования неполного сбора заряда в приповерхностном или мертвом слое использовалась функция, представленная на Рис. 3.3.

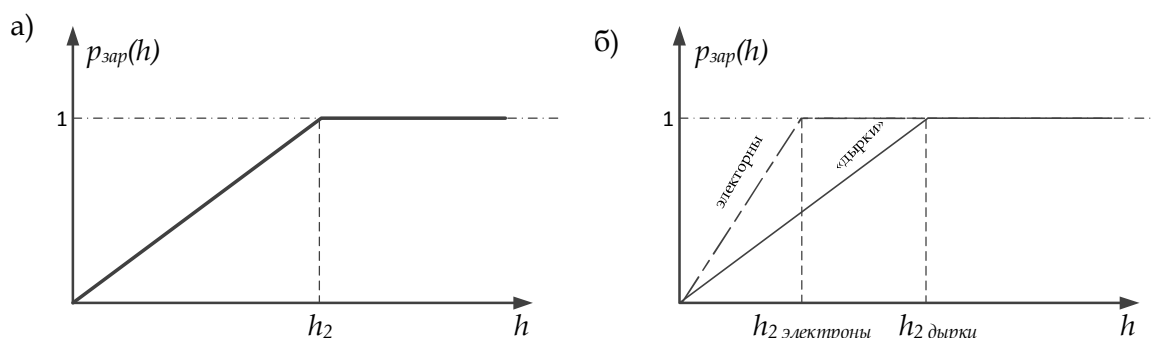


Рис. 3.3. Зависимость эффективности сбора заряда $p_{зар}(h)$ от глубины регистрации рентгеновского фотона. Толщина мертвого слоя h_2 задается как параметр и зависит от конкретного детектора. а) для одинаковой эффективности сбора заряда обоих знаков; б) для разной эффективности сбора заряда электронов и дырок.

На втором этапе по заданным начальным условиям производится предварительный расчет функций распределения вероятностей для основных процессов, происходящих в веществе детектора: фотопоглощение, когерентное и некогерентное рассеяние, а также в области больших энергий ($> 1\text{МэВ}$) – образование электрон-позитронных пар[143,144].

Это позволяет значительно сократить время основных расчетов, но вносит незначительную погрешность, связанную с дискретностью шага расчета функций распределения. В наших расчетах шаг, с которым производятся предварительные расчеты для функций, имеющих зависимость от энергии $f(E)$, составляет 0.1 кэВ. Для угловых распределений θ и φ он составляет 0.01 радиан.

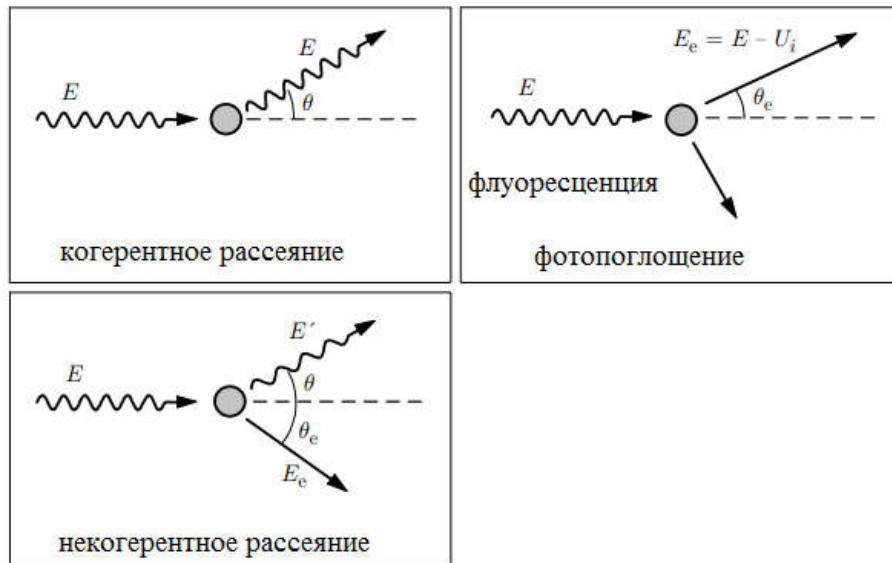


Рис. 3.4. Моделирование процессов взаимодействия излучения с веществом методом Монте-Карло

Вероятность процесса поглощения фотона с энергией E_0 веществом детектора с атомным номером Z с ионизации оболочки i будет определяться выражением:

$$dP_i = \tau_i(E_0) \rho dl, \quad (3.2)$$

где $\tau_i(E_0)$ - массовый коэффициент фотоэлектрического поглощения i -оболочкой в объеме ρdl , ρ - плотность вещества детектора.

Выражение для вероятности когерентного рассеяния фотона в веществе, согласно [145], определяется выражением:

$$\frac{d^2 P_{coh}(\theta)}{d\theta \cdot dl} = \rho \frac{N_A}{A} \cdot \frac{d\sigma^K(\theta)}{d\Omega} \cdot 2 \cdot \pi \cdot \sin(\theta) \cdot F^2, \quad (3.3)$$

где $\frac{d\sigma^K}{d\Omega}$ - дифференциальное сечение когерентного рассеяния, определяемое формулой Томсона, F - атомный форм фактор.

Вероятность процесса некогерентного рассеяния будет иметь следующий вид:

$$\frac{d^2 P_{comp}(E_0 \rightarrow E(\theta))}{d\theta \cdot dl} = \rho \frac{N_A}{A} \cdot \frac{d\sigma^{KHT}(\theta)}{d\Theta} \cdot S, \quad (3.4)$$

где $\frac{d\sigma^{KHT}}{d\Omega}$ - дифференциальное сечение некогерентного рассеяния, S - функция некогерентного рассеяния.

Угол рассеяния θ разыгрывается из угловых распределений вероятностей в диапазоне углов от 0 до 2π процессов поглощения, когерентного и некогерентного рассеяния по всем энергиям в диапазоне от 0 до E_0 (см. рис. 3.5) Распределение угла φ считается равномерным по диапазону 0 до 2π и определяется величиной $\varphi = 2\pi \cdot random$, где $random$ – случайное число в диапазоне от 0 до 1.

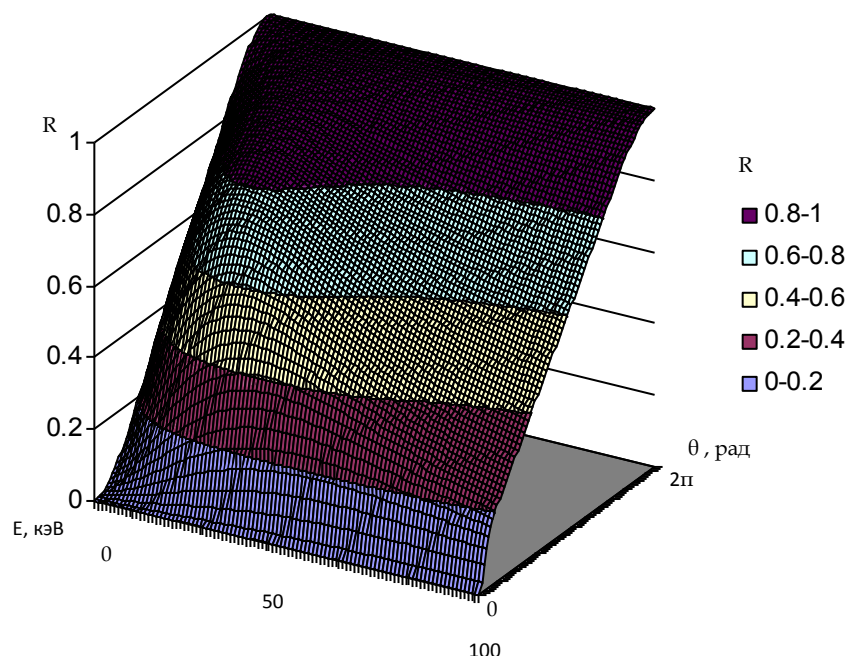


Рис. 3.5. Пример расчет функции распределения F^{-1} вероятностей для розыгрыша азимутального угла θ процесса когерентного рассеяния.

После предварительного расчета всех необходимых параметров производится последовательное моделирование траекторий прохождения первичного рентгеновского фотона, которое повторяется $N0$ раз.

На Рис. 3.6 представлен алгоритм траекторного моделирования.

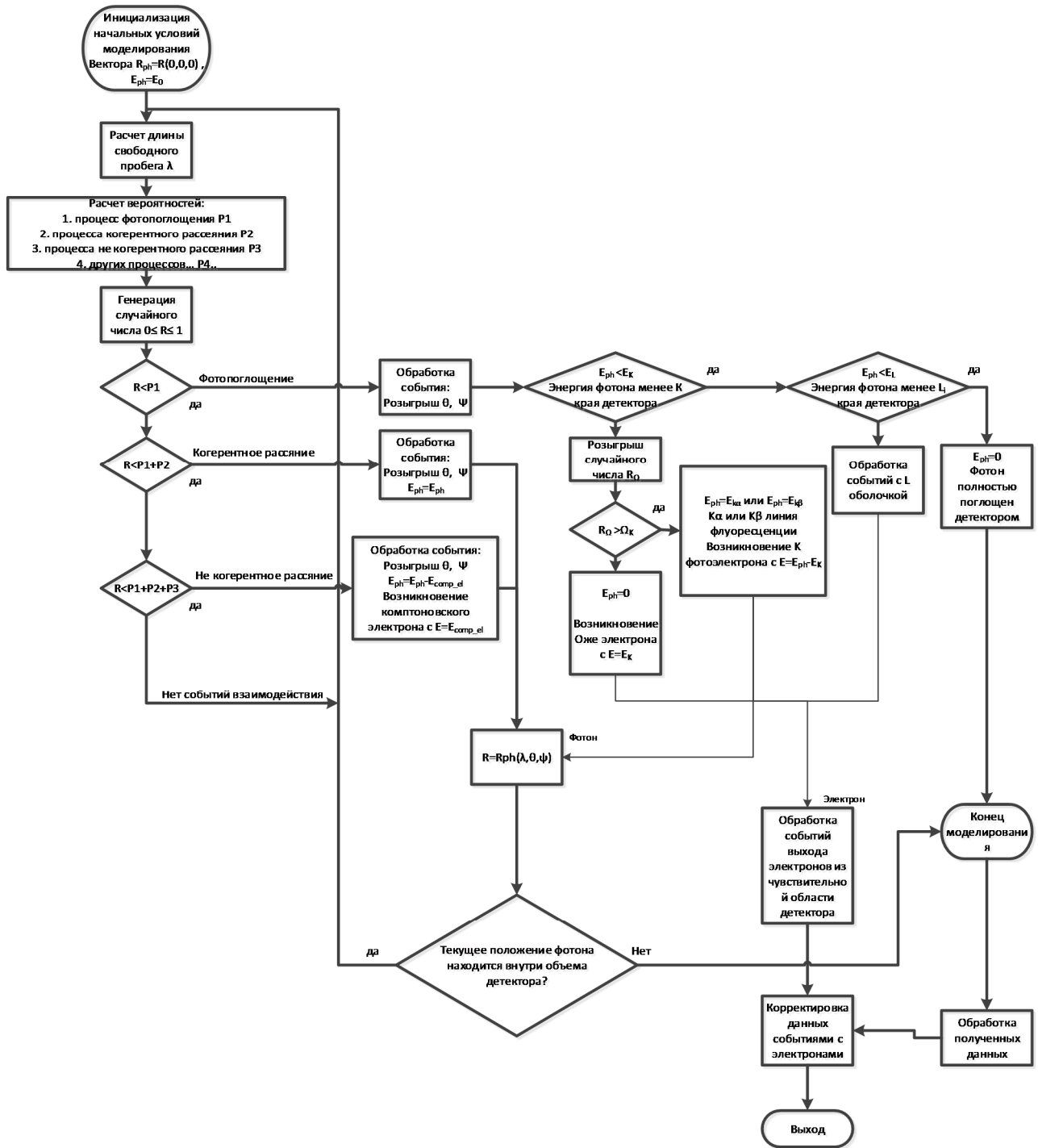


Рис. 3.6. Алгоритм для функции моделирования траекторий прохождения рабочего объема детектора первичным рентгеновским фотоном по методу Монте-Карло.

Алгоритм моделирования траекторий состоит из следующих основных составляющих:

- расчета элементарного шага Δs ;
- розыгрыша типа процесса (поглощение, когерентное и некогерентное рассеяние);
- расчета углов рассеяния;
- расчета величины потери энергии и выхода электронов.

Каждое из испытаний имеет идентичные начальные условия для функции моделирования траекторий.

Теперь подробно опишем функцию моделирования траекторий (см. Рис. 3.7). Рентгеновский фотон с энергией E_0 попадает в рабочий объем детектора, в точке $(0,0,0)$ координат, связанных с детектором. Направление, заданное единичным вектором \vec{v} , равно $(0,0,1)$.

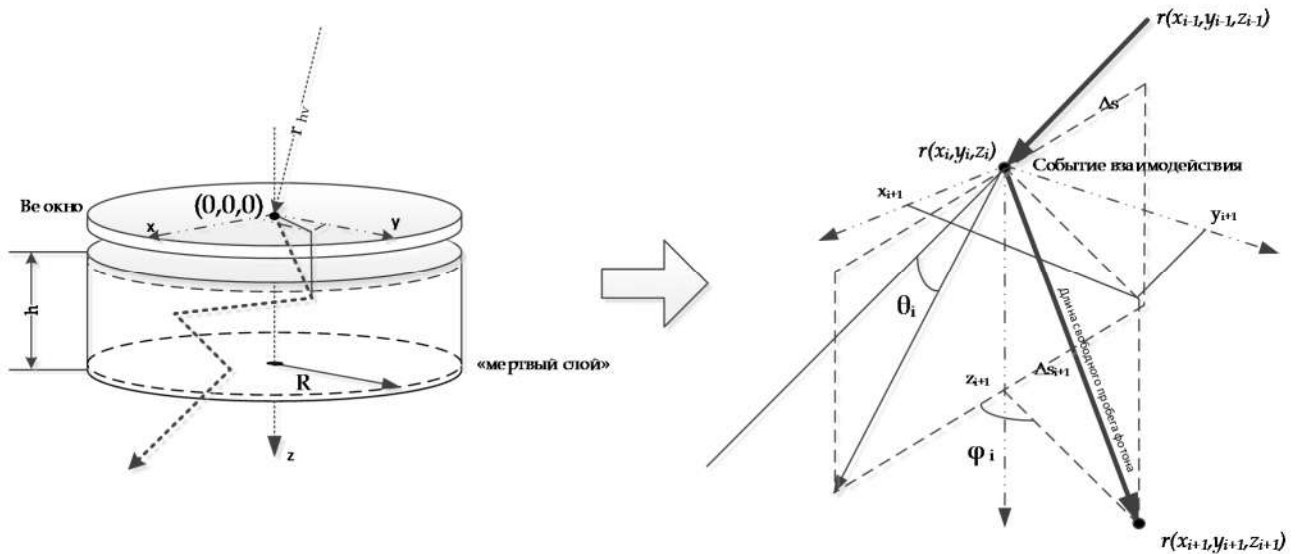


Рис. 3.7. Пояснения к моделированию траектории пробега фотона в веществе детектора

Далее производится расчет элементарного шага перемещения Δs внутри объема детектора (функция `Get_ds`), который зависит от энергии рентгеновского фотона и его положения относительно приповерхностного слоя, также разыгрывается тип процесса (функция `Get_process`).

Положение частицы в процессе перемещения внутри объема детектора описывается следующим выражением:

$$r_i = r_{i-1} + \Delta s \cdot \begin{pmatrix} \sin \theta_{i+1} & \cos \varphi_{i+1} \\ \sin \theta_{i+1} & \sin \varphi_{i+1} \\ \cos \theta_{i+1} & \end{pmatrix}$$

$\Delta s = k \cdot l(E) \cdot \bar{v}$, где $l(E)$ - длина свободного пробега фотона либо электрона в веществе, \bar{v} - единичный вектор направления полета частицы, k - коэффициент, определяющий количество шагов, на которые будет разбит путь свободного пробега частицы в веществе [44]. Для расчетов в рабочей области детектора используется $k=0.1$, но так как дискретность пробега должна быть существенно меньше толщины мертвого слоя h_2 , величина Δs в приповерхностном слое выбирается $0.1 \mu m$ вне зависимости от длины свободного пробега $l(E)$.

Тип процесса определяется из распределения вероятностей следующим образом:

- разыгрывается случайное число R ;
- рассчитываются вероятность фотопоглощения ($P1$), вероятность когерентного ($P2$) и некогерентного ($P3$) процессов, сумма $P1+P2+P3 < 1$. Процесс отсутствия взаимодействия определяется, как $P4 = 1 - (P1+P2+P3)$. Данные вероятности зависят от текущей энергии рентгеновского фотона;
- далее, согласно условиям определяется текущий процесс:
 - $R \leq P1$, то это фотопоглощение;
 - $P1 < R \leq P1 + P2$ - процесс когерентного рассеяния;
 - $P1 + P2 < R \leq P1 + P2 + P3$ - процесс некогерентного рассеяния;
 - $R > P1 + P2 + P3$ - отсутствие взаимодействия.

На основании разыгранного типа взаимодействия производятся следующие действия:

- корректировка направления движения частицы (розыгрыш углов θ и φ), и единичного вектора направления \bar{v} , расчет вектора \vec{r} текущего положения частицы внутри рабочего объема детектора, если частица покинула рабочий объем, то дальнейший расчет функции моделирования траекторий останавливается;

- расчет изменения энергии рентгеновского фотона в процессе фотопоглощения с последующим процессом флуоресценции, либо некогерентного рассеяния;

Рассмотрим подробнее эти действия в зависимости от типа разыгранного процесса. В случае розыгрыша процесса «отсутствие взаимодействия» производится только изменение положения \vec{r} , вектор направления \vec{v} сохраняет свое значение. Осуществляется только контроль положения рентгеновского фотона внутри объема детектора. Энергия фотона при этих процессах не изменяется.

Для случая когерентного рассеяния производится розыгрыш углов рассеяния θ и азимутального φ , частица изменяет свое направление и в соответствии с этим изменяется значение вектора \vec{v} , а также вектора положения \vec{r} , аналогично «отсутствию взаимодействия» энергия рентгеновского фотона не изменяется.

Результатом некогерентного взаимодействия является возникновение т.н. комптоновского электрона с энергией $E_{el} = E - \frac{E}{1 + \frac{E}{m_0 c^2} (1 - \cos \theta)}$. Рентгеновский фотон

изменит свое направление \vec{v} и потеряет энергию. Углы рассеяния θ и азимутальный φ будут разыграны в соответствии с распределениями для данного типа взаимодействия. Если в процессе взаимодействия фотон не покинул рабочую область детектора, то после корректировки вектора положения движение фотона продолжается внутри рабочего объема детектора.

События поглощения имеют более сложную процедуру расчета. В зависимости от энергии рентгеновского фотона производится оценка возникновения следующих событий:

- если $E \geq E_K$, то происходит возбуждение К оболочки с вылетом К фотоэлектрона, либо возникновение безрадиационного перехода и соответствующего электрона Оже; существует вероятность возбуждения характеристической линии K_α или K_β , либо полного поглощения (розыгрыш события с вероятностью выхода флуоресценции ω);
- если $E_L \leq E < E_K$ то происходит возбуждение L оболочки с вылетом L фотоэлектронов, а также становится не нулевой вероятностью возбуждения

излучения характеристической линии $L_{1..3}$, либо полного поглощения фотона при данном событии;

- в остальных случаях происходит полное поглощение рентгеновского фотона;

Углы рассеяния θ и азимутальный φ разыгрываются в соответствии с распределениями для данного типа взаимодействия только для случаев возбуждения К или L оболочек.

В отличие от процесса когерентного рассеяния при возникновении комптоновских, фото- или Оже электронов необходимо произвести расчет потери энергии при вероятном их выходе из рабочей области детектора, а также возможный спектр их торможения при пробеге в веществе. Методика расчета этого вклада основана на работах [146,147,148,149].

В результате этих процессов фотон, попавший в чувствительный объем детектора с начальной энергией E , и вследствие взаимодействия потерявший ее часть, покинет его с некоторой энергией E_{out} , а оставшиеся в результате этих процессов электроны могут быть зарегистрированы с энергией:

$$E_{reg} = E - E_{out} \quad (3.5)$$

При таких процессах образуется пик вылета случае выхода из детектора флуоресцентного фотона, а также «горб» потерь для случая комптоновского рассеяния.

Вероятность возникновения фотона тормозного излучения электронов описывается следующим общим соотношением:

$$P_{торм}(E) = P(E_0 \rightarrow E_{elec}) \cdot P(E_{elec} \rightarrow E), \quad (3.6)$$

где E_0 - энергия первичного фотона, попадающего в детектор, E_{elec} - энергия электрона, возникшего в процессе взаимодействия фотона с веществом. В зависимости от типа процесса вероятность $P(E_0 \rightarrow E_{elec})$ будет принимать следующий вид:

1. для тормозного излучения фотоэлектронов

$$P(E_0 \rightarrow E_{elec}) = \tau_i(E_0) \quad (3.7)$$

2. для тормозного излучения Оже электронов

$$P(E_0 \rightarrow E_{elec}) = \tau_i(E_0)(1 - \omega_K) \quad (3.8)$$

3. для тормозного излучения электронов отдачи

$$P(E_0 \rightarrow E_{elec}(\theta)) = \rho \frac{N_A}{A} \cdot \frac{d\sigma^{KHT}(\theta)}{d\theta} \cdot S, \quad \text{где } \frac{d\sigma^K}{d\Omega} \text{ - дифференциальное сечение}$$

когерентного рассеяния, определяемое формулой Кляйна-Нишины-Тамма, S - функция некогерентного рассеяния.

Величина $P(E_{elec}, E)$, описывающая вероятность возникновения тормозного излучения с энергией E при торможении электрона с энергией E_{elec} , представляет собой формулу Крамерса для энергетического распределения тормозного излучения:

$$P(E_{elec}, E) = \begin{cases} 0.6 \cdot 10^{-5} \frac{Z}{E} (E_{el} - E) B(E) \frac{T}{L}, & , E < E_{el} \\ 0 & , E \geq E_{el} \end{cases}, \quad (3.9)$$

Таким образом, разработан алгоритм, реализующий методом Монте-Карло моделирование функции отклика полупроводникового детектора, учитывающий основные процессы взаимодействия излучения с веществом. Ниже приведены результаты расчетов согласно этой модели.

3.1.2 Результаты расчета функции отклика детектора

Рассмотрим структуру расчетной функции отклика детектора $K(E, E_0)$ для Si(Li) детектора, которая является функцией вероятности регистрации фотона с энергией E_0 как фотона с энергией E (Рис. 3.8).

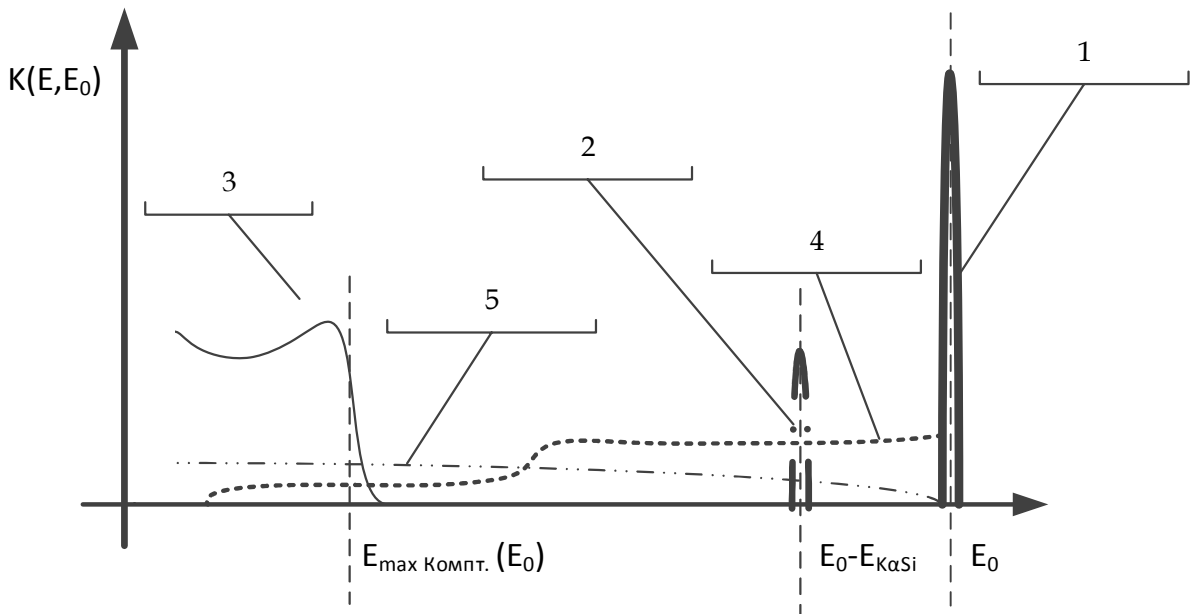


Рис. 3.8. Структура функции отклика Si(Li) детектора: 1- пик полного поглощения; 2- пик К-потерь; 3- «горб» («плато») потерь, связанный с процессом комптоновского рассеяния; 4- «хвост» мертвого слоя; 5- «хвост», связанный с выходом электронов высоких энергий.

Как видно из Рис. 3.8 для Si(Li) детектора в случае полного поглощения первичного рентгеновского фотона $K(E, E_0)$, он регистрируется в пике полного поглощения с энергией E_0 (Рис. 3.8 (1)), с учетом приповерхностного слоя в структуре присутствует т.н. «хвост» мертвого слоя; для случая фотопоглощения с выходом флуоресцентного фотона — в пике потерь с энергией $E_0 - E_{K\alpha Si}$; для случая комптоновского процесса с выходом комптоновского фотона из рабочей области детектора — «плато» потерь с энергией от нуля до $E_{\max_Компт}(E_0)$; для случая выхода электронов высоких энергий из чувствительной области детектора в «хвосте» потерь.

Рассмотрим аналогичную структуру функции отклика Ge детектора (см Рис. 3.9.).

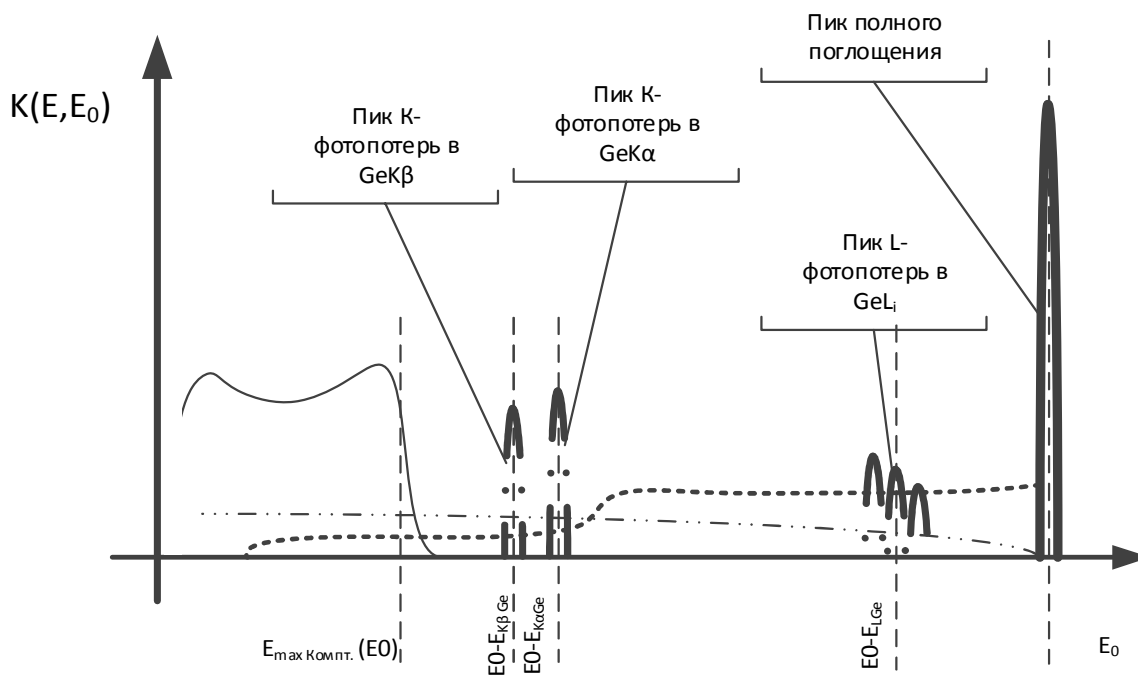


Рис. 3.9. Структура функции отклика Ge детектора.

Функция отклика детектора для Ge детектора имеет более сложную структуру, что обусловлено присутствием пиков потерь, связанных с высокой вероятностью процессов фотопоглощения K и L оболочек с последующим выходом из детектора флуоресцентных фотонов. В области энергий фотонов до 5 кэВ, основным вкладом является L пик потерь, соответствующий L излучению Ge; в области энергий фотонов более 5 кэВ наблюдается высокая вероятность выхода флуоресцентного фотона Ge из детектора, вследствие большего, чем у Si, выхода флуоресценции, это обуславливает высокую вероятность регистрации фотонов в K пике потерь. С ростом энергии фотона вероятность регистрации в K - пике потерь монотонно снижается, при энергии 50-60 кэВ остается не менее 1%. Следствием этого а амплитудном спектре будут наблюдаться дополнительные «линии» с энергией пиков, отличающиеся от основных линий спектра на энергию $K\alpha$ и $K\beta$ флуоресценции германия. При этом вероятность регистрации в «горбе потерь» вследствие лучшего поглощения будет значительно меньше чем для кремниевого детектора[150].

На Рис. 3.10 и 3.11 представлены результаты моделирования функции отклика Si(Li) и Ge детекторов для энергии первичного рентгеновского фотона 5 кэВ (с отдельным рассмотрением элементов функции отклика детектора) и 59.6 кэВ соответственно.

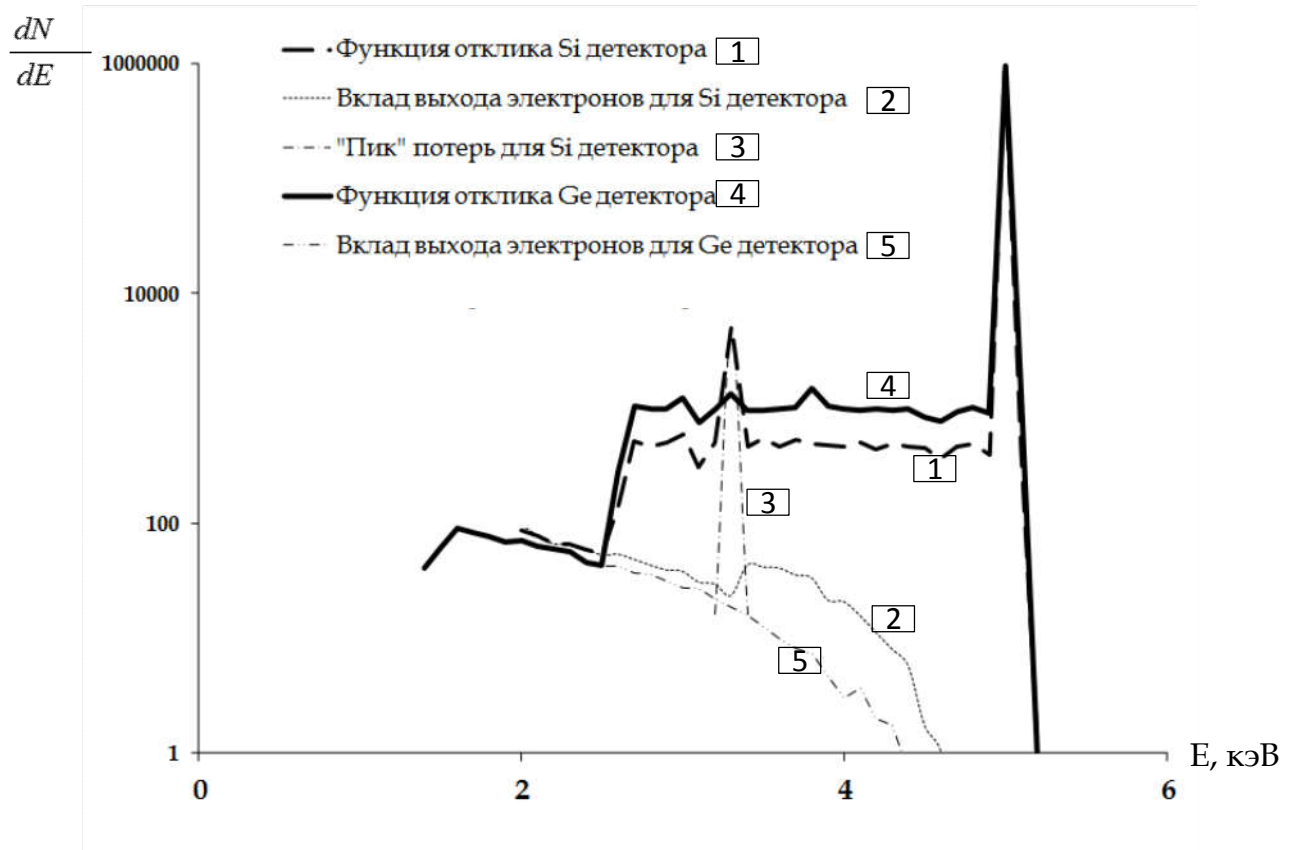


Рис. 3.10. Пример расчета отклика детектора для Ge и Si детекторов со следующими параметрами: диаметр детектора $d=0.15$ мм, толщина $h=0.5$ см, мертвый слой $h_2=0.2$ мкм, энергия первичного рентгеновского фотона 5 кэВ. На рисунке так же представлены отдельные вклады составляющих функции отклика детектора: вклад электронов покинувших объем детектора, вклад «пика» потерь. ($\frac{dN}{dE}$ в

относительных единицах, соответствующих $\int_0^{E_{max}} \frac{dN}{dE} dE = N_0$)

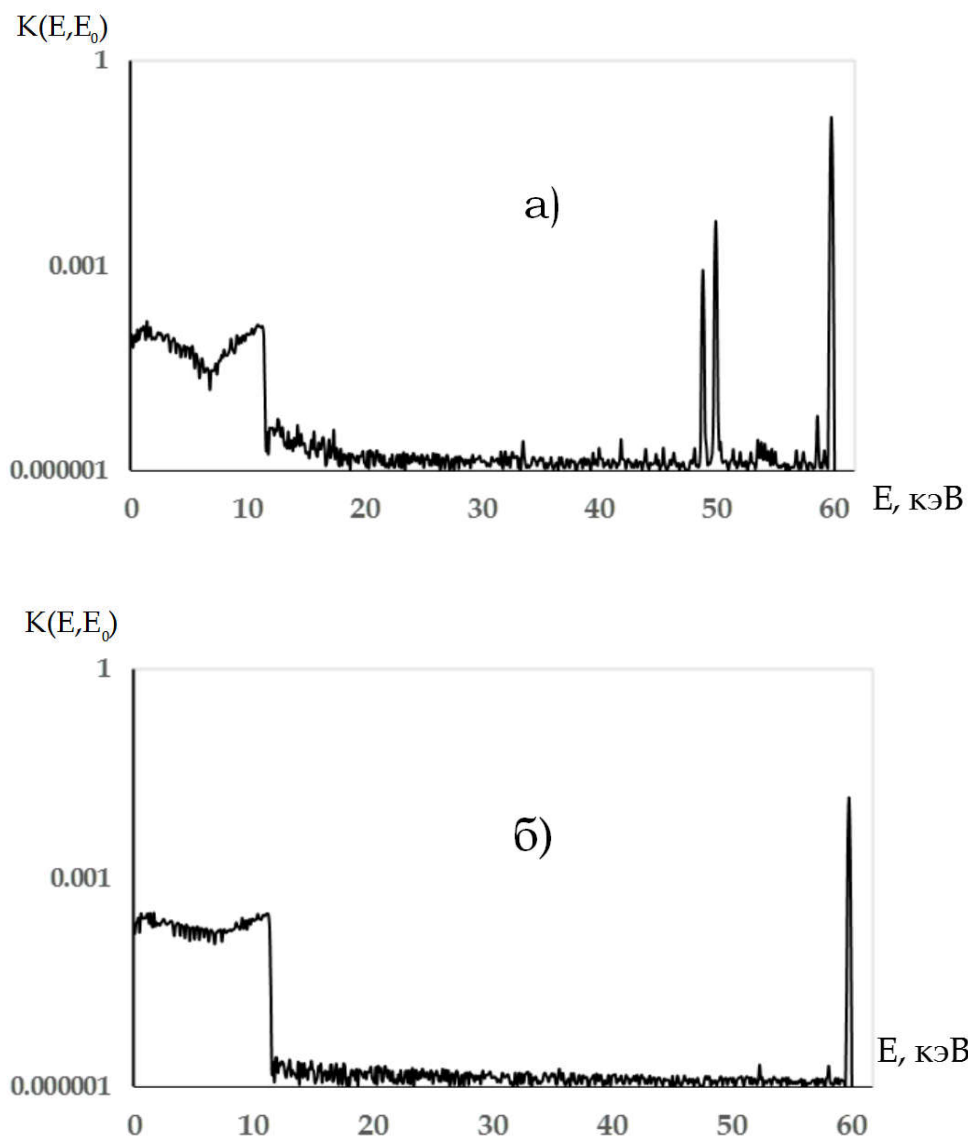


Рис. 3.11. Пример расчета функции отклика детектора для Ge (а) и Si (б) детекторов со следующими параметрами: $d=0.15$ см, $h=0.05$ см, толщина «мертвого» слоя 0.2 мкм, энергия первичного рентгеновского фотона 59.6 кэВ. График построен в относительных единицах, для которых $\int_0^{E_{\max}} \frac{dN}{dE} dE = 1$.

На Рис. 3.12 и Рис. 3.13 представлены вероятности регистрации в пике полного поглощения и вероятность регистрации в горбе потерь при различных величинах толщины однослойного детектора, для оценки ее влияния на характеристики детектора.

Толщина рабочего объема детектора влияет на регистрацию рентгеновского фотона в «рабочем» объеме детектора. С ростом энергии возрастает вероятность выхода фотона без взаимодействия с веществом детектора, т.е происходит приближении длины свободного

пробега к значениям соизмеримым с геометрическими размерами детектора. С ростом энергии вероятность регистрации фотона в горб потерь Si детектора, которая связана с комптоновским эффектом, становится значимой. В районе 50-70 кэВ вклад комптоновского процесса становится примерно равным вероятности поглощения, а далее превосходит ее, что определяется сечениями взаимодействия соответствующих процессов. В связи с этим расчетная эффективность кремниевого детектора для области высоких энергий (более 30-60 кэВ) быстро уменьшается и увеличение толщины рабочего объема детектора не приводит к сколько-нибудь значимым результатам, так как одновременно увеличивает вероятность регистрации фотона в «горбе» потерь.

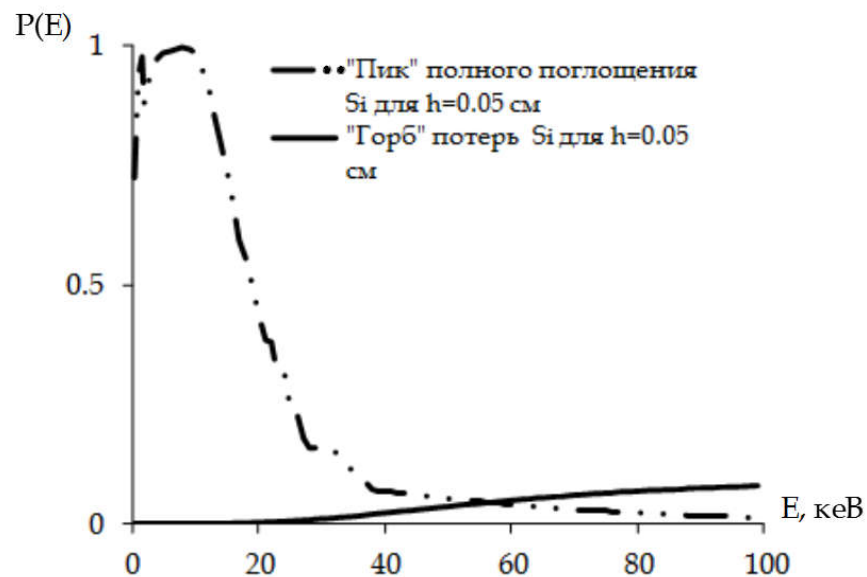


Рис. 3.12 Вероятность регистрации фотона в пике полного поглощения и гребне потерь для Si детектора для толщины детектора 0.05 см.

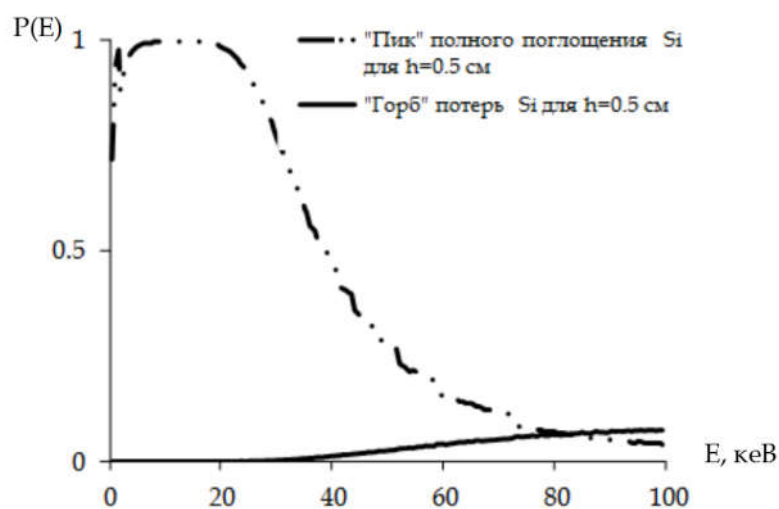


Рис. 3.13. Вероятности регистрации фотона в пике полного поглощения и "гобре" потерь для Si детектора, толщина детектора 0.5 см.

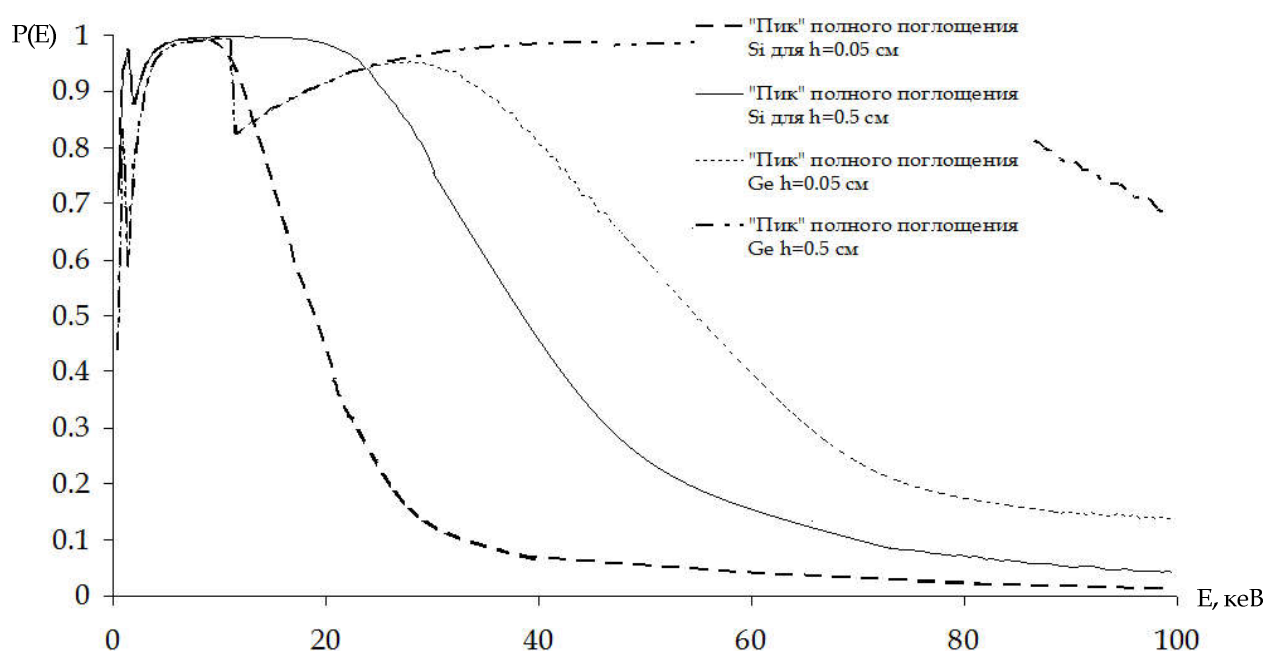


Рис. 3.14. Сравнение вероятности регистрации фотона в пике полного поглощения для детекторов, выполненных из Si, с толщиной активной области толщиной $h=0.05$ см (толстая прерывистая линия) $h=0.5$ см (сплошная тонкая линия); для Ge детектора с $h=0.05$ см (тонкая прерывистая линия) и с $h=0.5$ см (толстая штрихпунктирная линия)

В отличие от кремниевого детектора, поглощающая способность германия значительно выше, поэтому данный детектор более подходит для регистрации

высокоэнергетического излучения (Рис. 3.12 и Рис. 3.14). При толщине детектора более 0.5 см с эффективностью не менее 70-80 % может регистрироваться излучение в пике полного поглощения вплоть до энергий порядка 100 кэВ. Но, вследствие наличия K края поглощения в рабочей области энергий детектирования, кривая эффективности Ge - детектора имеет провал (Рис. 3.15), связанный с возрастанием вероятности регистрации фотона в пике потерь. Следует так же отметить, что расчетная вероятность регистрации фотона в пике потерь практически не зависит от толщины детектора, так как происходит преимущественно через входную поверхность детектора. На Рис. 3.16 представлено сравнение эффективности детекторов, изготовленных из различных материалов (Si, Ge).

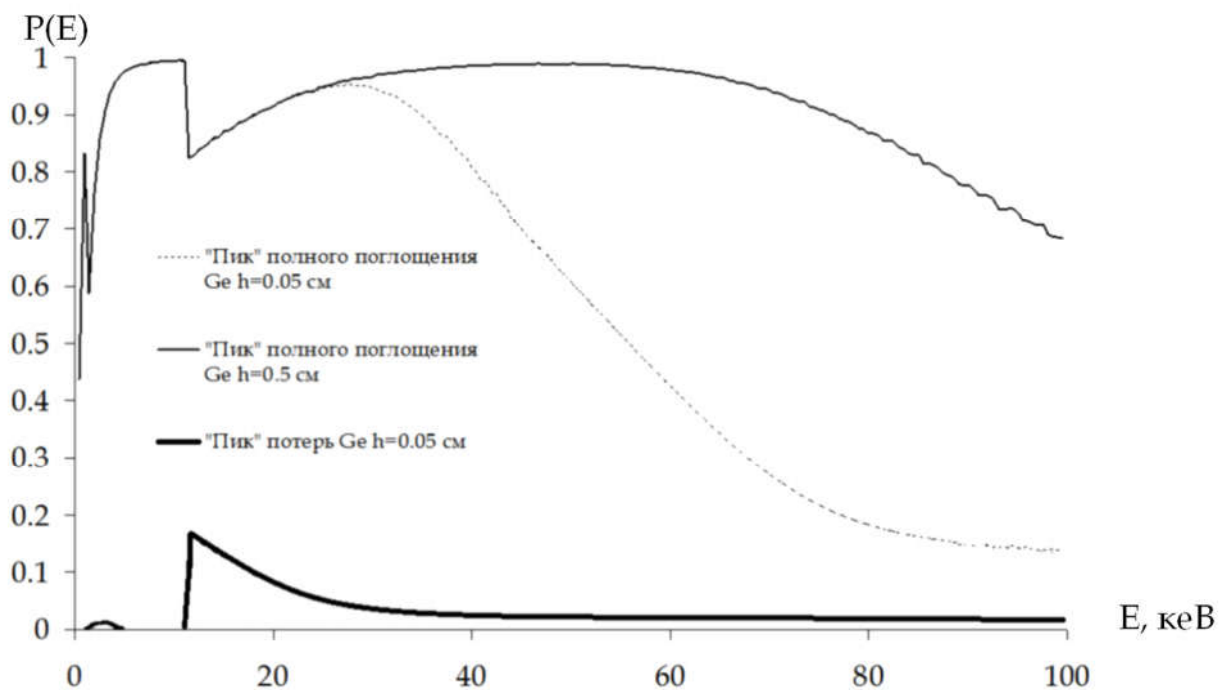


Рис. 3.15. Сравнение вероятностей регистрации первичного рентгеновского фотона для Ge детектора в «пике» полного поглощения с вероятностью регистрации в «пике» потерь (h – толщина детектора).

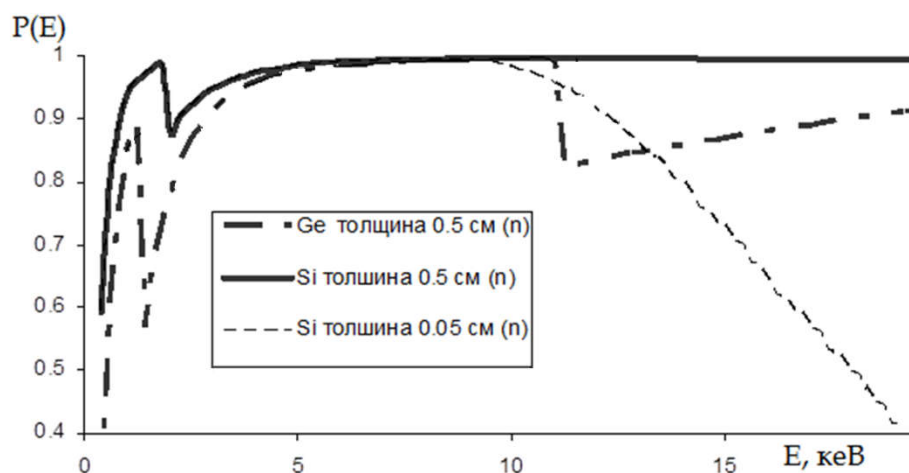


Рис. 3.16. Сравнение эффективности по пику полного поглощения детекторов изготовленных из Si и Ge в зависимости от толщины детектора.

Рассмотрим влияние параметров приповерхностного мертвого слоя на параметры функции отклика детектора. Рассмотрим расчетную зависимость функции отклика Si детектора от толщины мертвого слоя (см. Рис. 3.17).

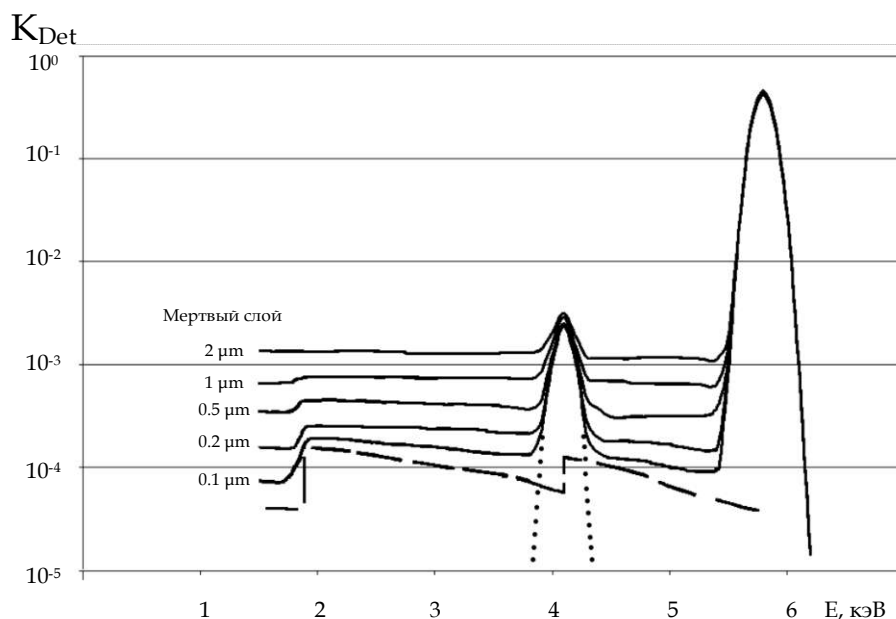


Рис. 3.17. Расчетная функция отклика Si(Li) детектора для энергии рентгеновских фотонов 5.9 кэВ в зависимости от толщины мертвого слоя от 0.1 до 2 μm .

Как показывает анализ получившейся зависимости функции отклика детектора при вариации толщины мертвого слоя, с уменьшением толщины этого слоя происходит

уменьшение вероятности регистрации фотонов в хвосте, связанном с неполным сбором заряда, и при $0.1 \mu\text{m}$ приближается к уровню хвоста, связанного с выходом электронов высоких энергий из чувствительной зоны детектора. Детальное рассмотрение вероятностей регистрации рентгеновского фотона в определенных частях функции отклика детектора для случаев $0.1 \mu\text{m} - 1 \mu\text{m}$ в диапазоне энергий от 0.1 до 30 кэВ показало, что происходит снижение эффективности детектора по пику полного поглощения, при этом вероятность регистрации фотона в остальных частях функции отклика детектора практически не изменяется. Вероятность регистрации фотона в хвосте потерь, обусловленная неполным сбором заряда, в данных диапазонах толщин приповерхностного мертвого слоя, пропорциональна толщине мертвого слоя вследствие того, что толщина мертвого слоя меньше, чем длина свободного пробега рентгеновского фотона в веществе детектора, что поясняется на Рис. 3.18. При этом можно заметить, что вероятность регистрации в хвосте, связанном с неполным сбором заряда, пропорциональна вероятности регистрации в пике потерь.

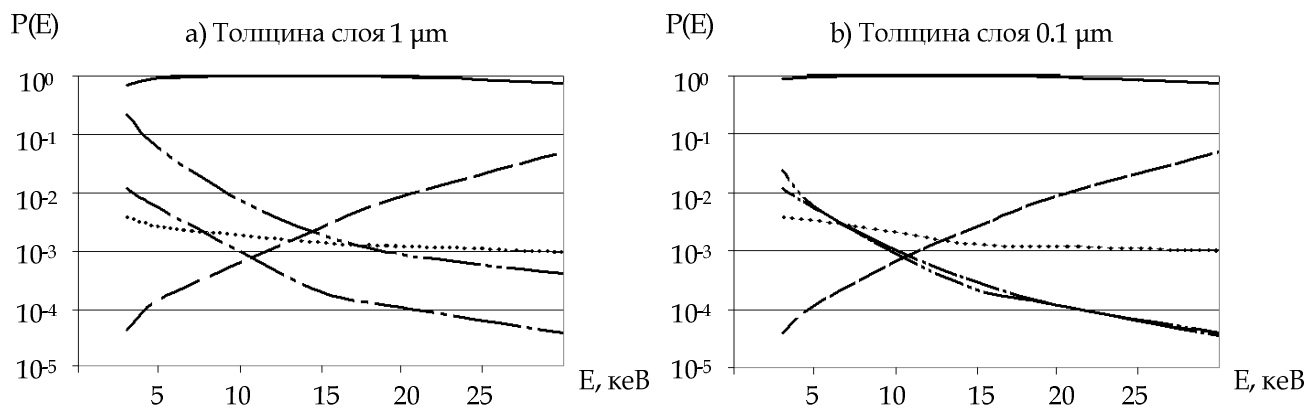


Рис. 3.18. Вероятность регистрации рентгеновского фотона в различных частях функции отклика Si детектора при одинаковой функции $p_{зар}(h)$ для обеих типов носителей заряда в Si детекторе (толщина детектора 5мм) в зависимости от толщины «мертвого» слоя (а. толщина – 1 мкм; б. толщина – 0.1 мкм) . Сплошная линия – вероятность регистрации в пике полного поглощения; точечная линия – вероятность регистрации в хвосте потерь; штрихпунктирная линия – вероятность регистрации в пике потерь; линия (штрих- две точки) – вероятность регистрации в хвосте, обусловленном неполным сбором заряда.

3.1.3 Сопоставление с экспериментальными данными

Для проверки результатов расчета было проведено сопоставление с экспериментальными данными некоторых работ [8,125] для радиоизотопных источников рентгеновского излучения ^{55}Fe и ^{241}Am .

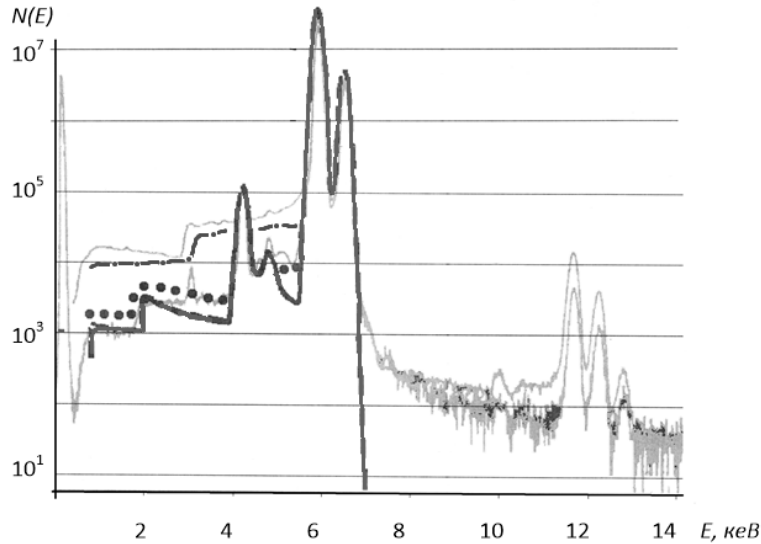


Рис. 3.19 Сопоставление расчетных и экспериментальных данных [125]. Амплитудный спектр полученный облучением Si(Li) детектора излучением источника ^{55}Fe ; толстая линия – результаты расчетов, точечная – результирующий вклад с учетом мертвого слоя 0.1μm детектора, штрих-пунктирная с учетом вклада мертвого слоя 2 μm, тонкие линии – экспериментальные данные работы [125].

Как видно из рисунка Рис. 3.19, где сопоставлены экспериментальные данные работы [125] и расчетные данные по пику полного поглощения и пику потерь, наблюдается удовлетворительное согласие данных эксперимента и расчета в диапазоне энергий до 7 кэВ. Наблюдаемые пики в области 7-12 кэВ вызваны неполной режекцией наложения импульсов в регистрирующей аппаратуре. Учет неполного сбора заряда, обусловленного наличием мертвого слоя в детекторе, позволяет улучшить согласие расчетных и экспериментальных данных, толщина мертвого слоя подбиралась экспериментально.

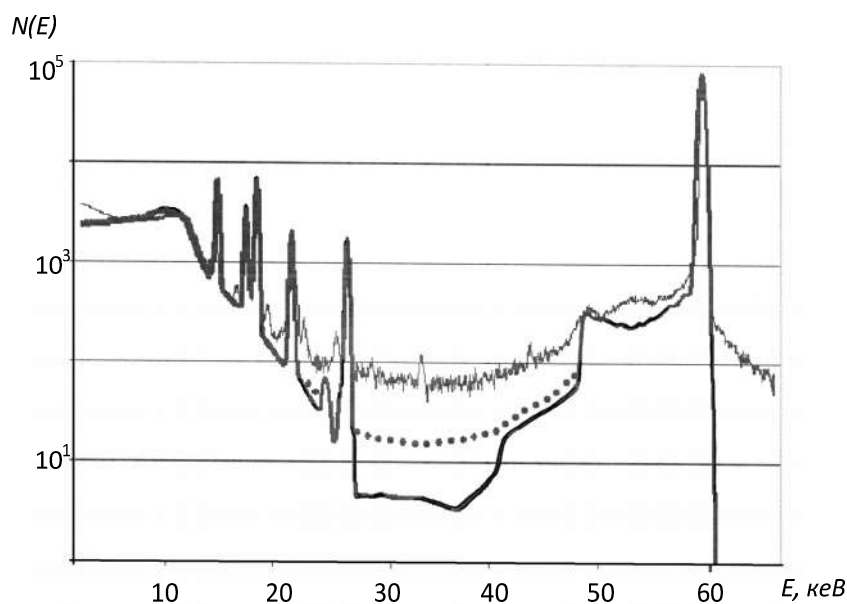


Рис. 3.20. Сопоставление расчетных и экспериментальных данных работы [8]. Амплитудный спектр, полученный облучением Si(Li) детектора излучением источника ^{241}Am ; толстая линия – результат расчетов данной работы, точечная – результат расчета с учетом вклада мертвого слоя детектора $0.1 \mu\text{m}$, тонкая линия – эксперимент работы.

На рисунке 3.20 рассмотрено сравнение экспериментальных данных работы [8] и полученных в результате расчета. Показано хорошее согласие расчетных и экспериментальных данных в диапазоне энергий 0-25 кэВ и 40-60 кэВ, это говорит о правильности выбранной модели. Наличие серьезных отклонений в области энергий 25-40 кэВ может быть вызвано рядом факторов, таких как неточность модели радиоактивного источника, неучёт тормозного излучения альфа частиц или электронов, возникающих и т.д. [151]

Приведенные выше результаты расчетов функции отклика детектора определяют лишь предельные характеристики детекторов излучения, определяемые только процессами взаимодействия в веществе детектора.

3.2 Модель двухслойного детектора

В качестве одного из возможных путей улучшения характеристик полупроводниковых детекторов является комбинирование детекторов из различных

материалов с целью компенсации искажений функций отклика детектора и улучшения соотношения сигнал/фон. Для поиска оптимальных параметров и материалов для реализации такого рода систем необходимо моделирование процессов взаимодействия на формирование суммарной функции отклика детектора.

3.2.1 Описание модели

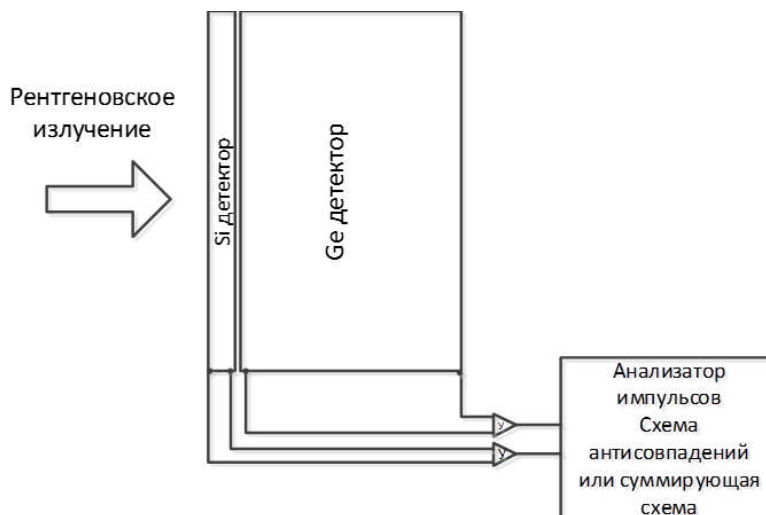


Рис. 3.21.Схема комбинированного двухслойного детектора

Рассмотрим модель комбинированного детектора состоящего из двух детекторов[152,153]. Детекторы обозначим, как *детектор 1* , *детектор 2*. Данная модель представляет собой систему из расположенных друг над другом полупроводниковых детекторов, представляющих собой цилиндрические тела с радиусом R и высотой $h_{дет1}$ и $h_{дет2}$ соответственно. При этом *детектор 1* расположен непосредственно напротив источника излучения, далее следует детектор 2. Перед входом в детектор 1 расположено бериллиевое окно, но для упрощения расчетов его влиянием можно пренебречь. Каждый из детекторов имеет свою регистрирующую аппаратуру, зарегистрированный сигнал от каждой из систем обрабатывается с помощью системы с учетом временных совпадений.

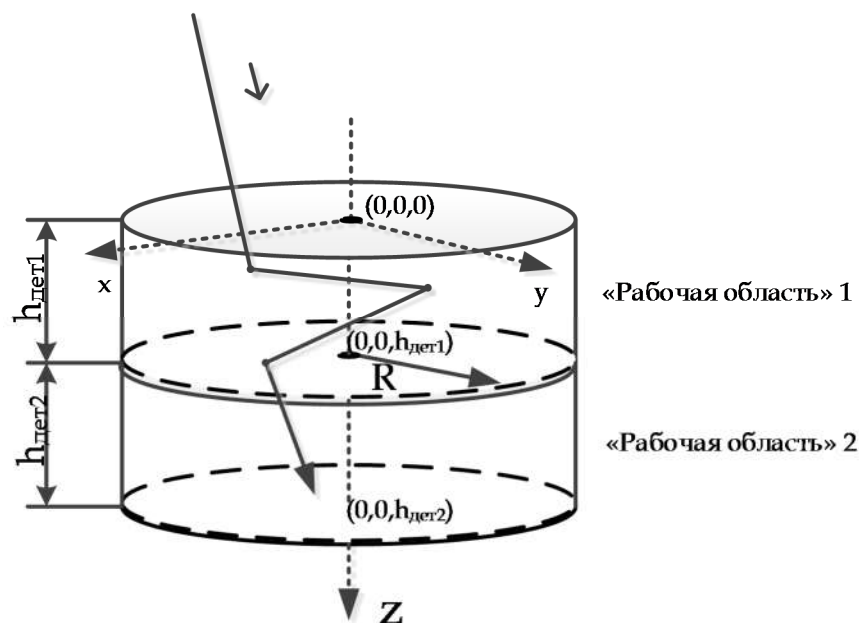


Рис. 3.22. Моделирование прохождения фотона в веществе в случае двухслойных детекторов.

Согласно модели за начало координат выбирается точка, находящаяся на поверхности цилиндрического тела *детектора 1* и совпадающая с его осью симметрии, первичный рентгеновский фотон с энергией E_{det} , имеет некоторый начальный вектор r_{i-1} , и попадает в активную область *детектора 1*. В результате взаимодействия внутри активной области фотон может быть либо полностью поглощен, преобразовавшись в поток электронов; может быть рассеян веществом детектора и покинуть его активную область с некоторой энергией $E_{det_out_1}$. Затем в зависимости от вектора r_{i_out} рентгеновского фотона, он либо попадает в *детектор 2* с энергией $E_{det_out_1}$, либо покидает систему детекторов. В случае попадания рентгеновского фотона в *детектор 2* в активной области происходят аналогичные процессы, и следовательно, фотон может быть полностью поглощен и зарегистрирован аппаратурой *детектора 2*, либо рассеян веществом *детектора 2* в активный объем *детектора 1*; либо покинуть систему детекторов. Геометрические расчеты осуществляются полностью идентично рассмотренному выше алгоритму для системы из одного детектора.

Алгоритм розыгрыша событий для расчета функции отклика детектора полностью совпадает с аналогичным от однослойного, за исключением рассмотрения более сложной

геометрической модели. На рис. 3.23 представлена блок-схема алгоритмов расчетов системы из 2х детекторов. Алгоритм состоит из следующих этапов:

- задание основных параметров моделирования: материал детектора, модель описания рабочего объема детектора (Этап 1);
- предварительный расчет распределений функции вероятности по различным процессам для каждого из детекторов системы (Этап Д1 и Д2);
- Функции поведенческого моделирования траекторий (Этап 3).

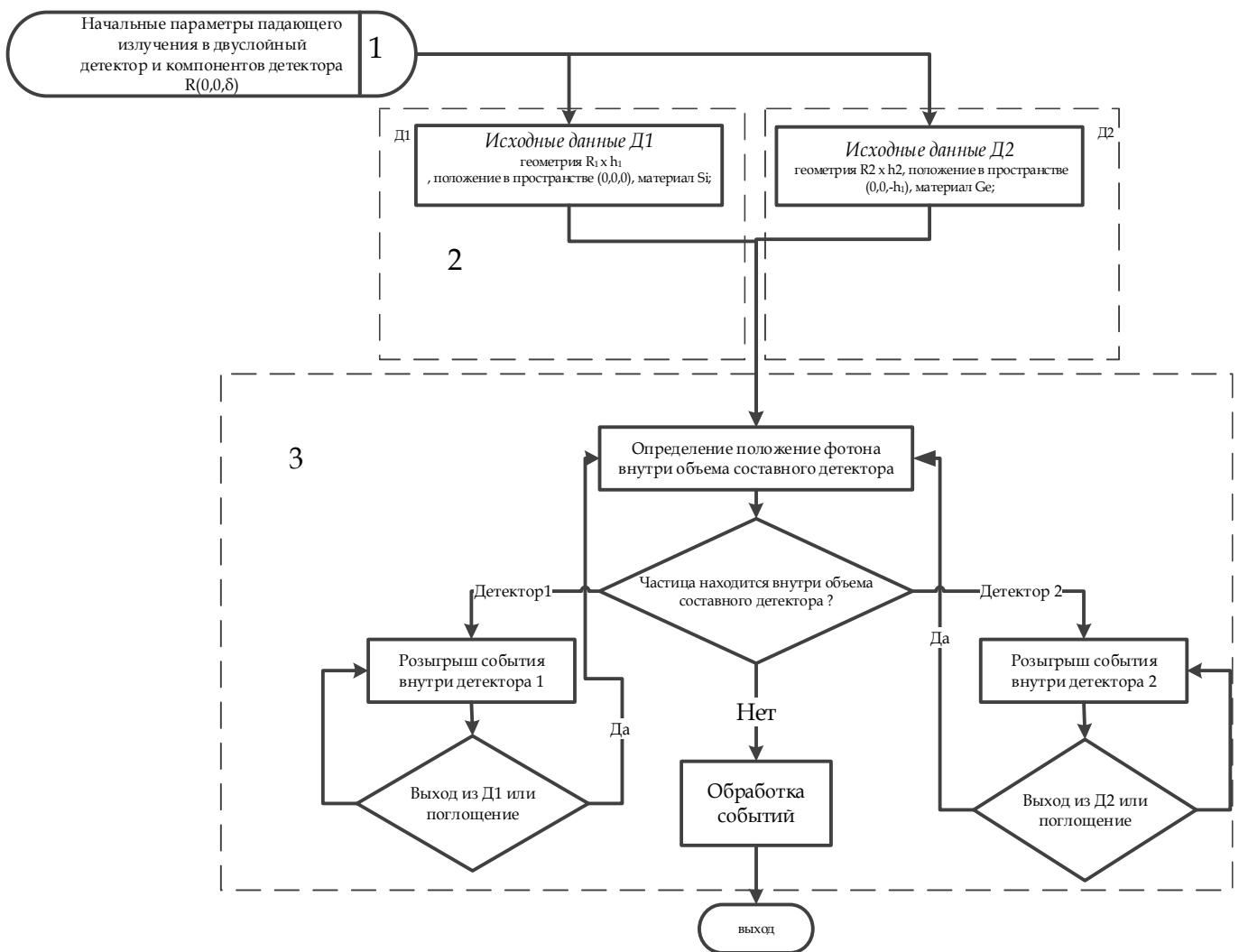


Рис. 3.23. Блок схема для пояснения расчетов функции отклика детектора на примере двуслойного детектора.

Для расчета задаются следующие необходимые начальные условия: геометрические размеры каждого детектора ($h_{дет1}$ – высота цилиндра, R - радиус); положение в пространстве

относительно начала координат: $X(x_i, y_i, z_i)$ - вектор положения детектора (например, для детектора 1 этот вектор будет согласно модели равен $(0,0,0)$, тогда для детектора 2 будет $(0,0,h_{\text{дет } 1})$, согласно модели детекторы располагаются непосредственно друг к другу) материал из которого выполнен детектор, состав детектора может быть как моноэлементным (например Si или Ge в чистом виде), так и составным (например, AsGa), могут быть смоделированы сложные системы, например комбинация Si и AsGa детекторов; глубина мертвого слоя, на основании экспериментальных данных существующих типов детекторов и их характеристик, для каждого из детекторов; толщину входного Be окна детектора (0.254 мм в наших расчетах); количество испытаний N0, необходимых для набора статистики взаимодействия согласно методу Монте-Карло.

На Рис. 3.24 представлена структура функции отклика детекторов для системы, состоящей из двух отдельных детекторов Si и Ge.

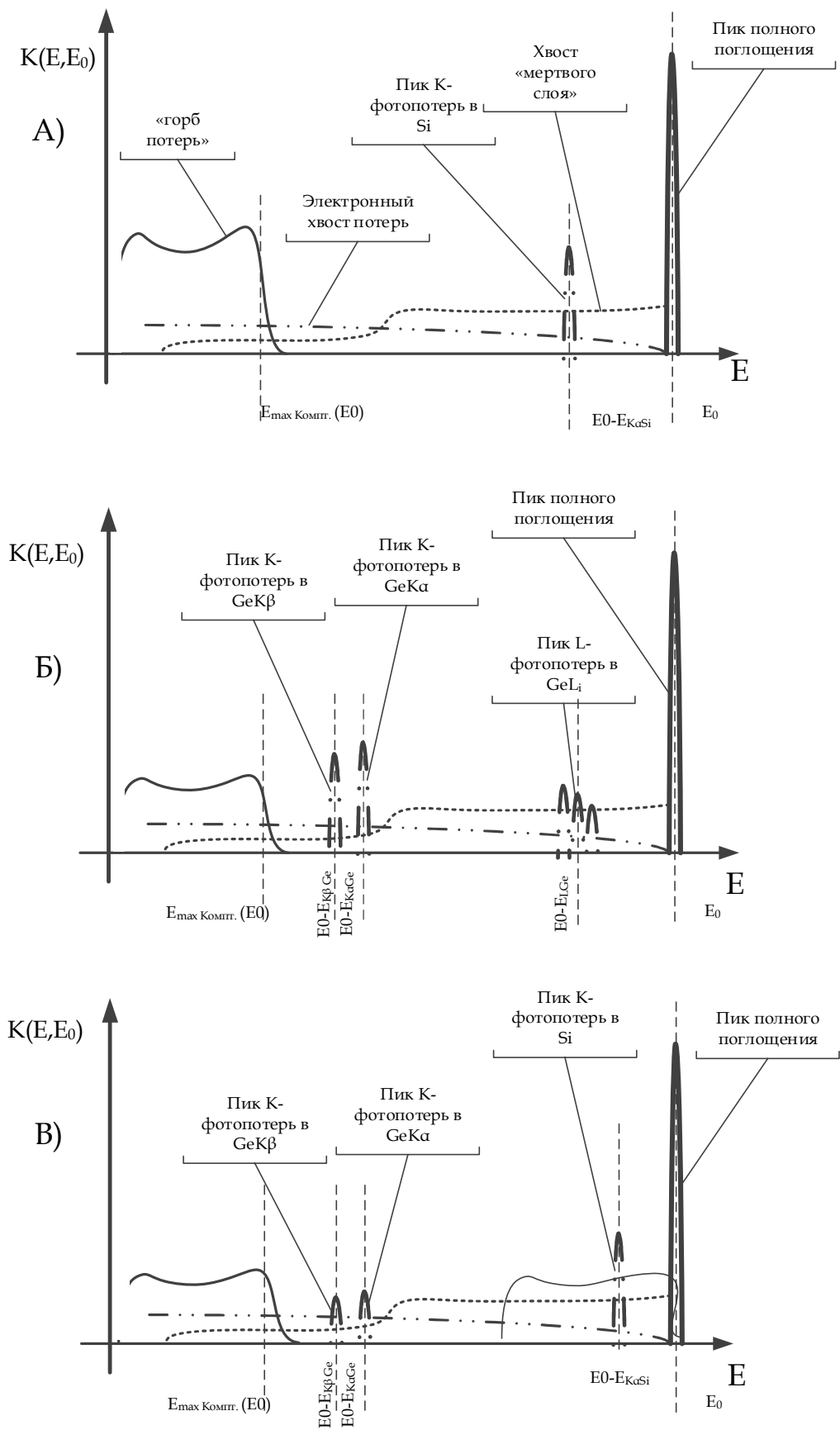


Рис. 3.24. Структура функции отклика детектора : А) Si детектора Б) Ge детектора В) Суммарная функция отклика составного детектора Si-Ge

В отличие от одиночного детектора структура функции отклика двух детекторов в составе системы оказывается более сложной. Это связано с тем, что при моделировании составного комбинированного детектора спектр излучения, возникающий при поглощении рентгеновских фотонов, имеет более сложную структуру, обусловленную процессами поглощения и некогерентного рассеяния [154]. Так, происходит наложение функций отклика детекторов составляющих систему. Например, в процессе прохождения активной области *детектора 1* первичным рентгеновским фотоном существует вероятность выхода флуоресцентного фотона, связанного с процессом поглощения из активной области *детектора 1*, и попаданием его в активную область *детектора 2*, что приведет к вероятности его поглощения в пике полного поглощения для $E_{0 \text{ дет}2} = E_{0 \text{ дет}1} - E_{K\alpha \text{ дет}1}$. Вероятны также и другие процессы, которые приведут к дополнительным вкладам в функцию $K(E, E_0)$, например, в суммарном спектре комбинированного детектора состоящего из *Si(Li)* и *Ge* присутствуют пики К потерь, как Si, так и Ge (с целью упрощения модели процессы регистрации в L пике потерь не рассматриваются). При этом интенсивность пиков потерь в комбинированном детекторе существенно ниже, чем для однослойных Ge или других полупроводниковых детекторов (например, AsGa и др.). Это связано с тем, что флуоресцентные фотоны Ge, выход которых через входную плоскость детектора сопровождается появлением пика потерь, эффективно поглощаются чувствительным слоем Si детектора.

3.2.2 Результаты моделирования процессов в двухслойном детекторе

Рассмотрим результаты моделирования поглощения излучения в комбинированном детекторе более подробно. В комбинированном детекторе регистрация фотонов энергии до 8-20 кэВ осуществляется в основном кремниевым детектором, имеющим в этом диапазоне энергий низкую вероятность регистрации фотона в пике потерь. При этом верхняя граница этого диапазона определяется толщиной кремниевого детектора. Результаты моделирования вероятности регистрации фотона двухслойного детектора представлены на Рис. 3.25.

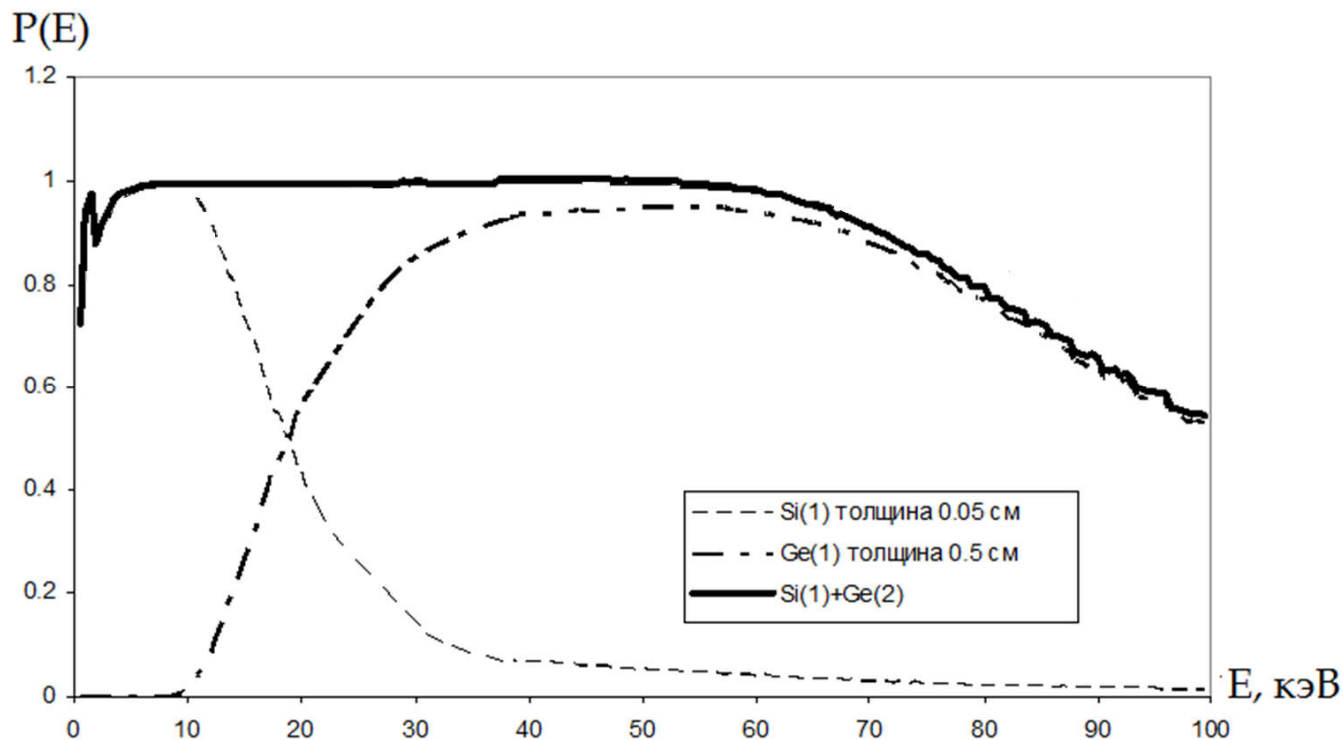


Рис. 3.25. Эффективность составного детектора из Si и Ge. Вероятности регистрации фотона в пике полного поглощения отдельных компонентов двойного детектора. Тонкая прерывистая линия – Si(Li) детектор толщиной 0.05 см; Толстая штрихпунктирная линия – Ge детектор с толщиной 0.5 см, расположенный непосредственно за Si; Толстая сплошная линия – эффективность составного детектора из Si(Li) и Ge.

При большей энергии фотона (диапазон энергий 8-40 кэВ) регистрация фотона происходит как в Si-, так и в Ge- детекторах. При этом фотон, возникший в процессе флуоресценции в веществе германиевого детектора и вышедший за его пределы через переднее окно Ge детектора в активную область кремниевого детектора, будет с большой долей вероятности в ней поглощен. Если рассматривать этот процесс независимо в каждом из детекторов, то данный фотон регистрируется в пике потерь германиевого детектора и в пике полного поглощения кремниевого. При этом эти события будут зарегистрированы практически одновременно и могут быть обработаны счетной и анализирующей электроникой. Аналогичная ситуация будет рассматриваться и для других одно и

многократных процессов рассеяния фотонов внутри вещества комбинированного детектора.

При дальнейшем росте энергии (более 40 кэВ) первичных фотонов, взаимодействие с веществом кремниевого детектора практически не происходит и регистрация осуществляется только германиевым детектором.

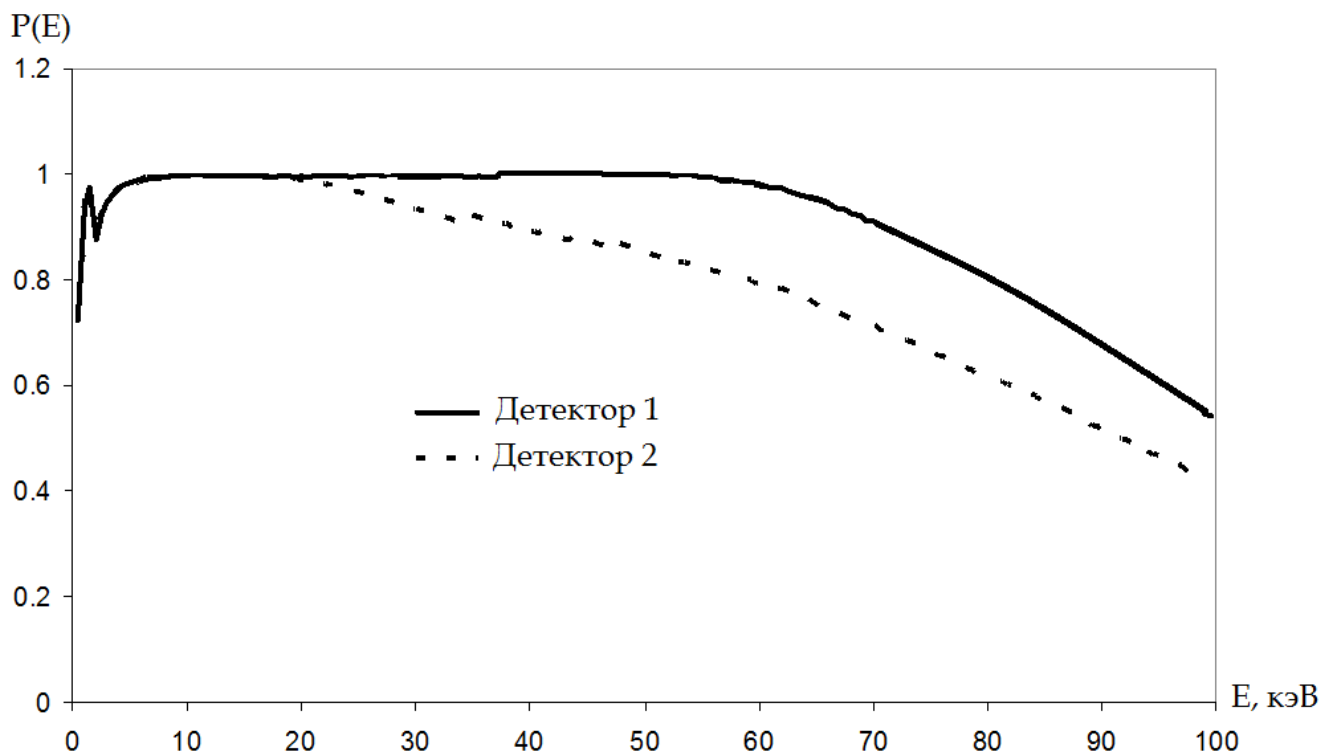


Рис. 3.26. Сравнение эффективности комбинированных детекторов с различной толщиной активного объема. 1) детектор 1: Si с толщиной активного объема 0.05 см и детектор 2: Ge с толщиной активного объема 0.5 см 2) Детектор 1: Si с толщиной активного объема 0.5 см и детектор 2: с толщиной активного объема 0.5 см.

Сравнение комбинированных Si-Ge детекторов с различными геометрическими параметрами показывает, что увеличение толщины кремниевого детектора ухудшает характеристики комбинированного детектора. Это обусловлено тем, что, как было показано выше, на примере одиночного детектора, с ростом толщины детектора в пределах до 5 мм и более, вероятность регистрации фотонов больших энергий (более 40-60 кэВ) практически не возрастает, при этом наблюдается рост регистрации в «горбе» потерь, связанном с комптоновским рассеянием. Эти эффекты приводят к снижению

эффективности по пику полного поглощения системы из двух детекторов. Поэтому толщина Si- детектора, устанавливаемого перед Ge детектором, должна быть такая, чтобы эффективность Si- детектора на линиях флуоресценции германия, была близка к единице[149]; эффективность Si- детектора в области энергий более 20-30 кэВ, должна быть минимальна, для того чтобы обеспечить низкую вероятность регистрации излучения в «горбе» потерь, следовательно, согласно расчетам, толщина кремниевого детектора должна быть в районе 1 мм.

При сравнении комбинированного полупроводникового детектора с однослойным (Ge или AsGa детекторами) можно выделить следующие преимущества [155]:

- вероятность регистрации в пике полного поглощения при высоких энергиях излучения, близка к эффективности одиночного Ge- или AsGa- детектора (так как, определяется поглощением второго детектора);

- отсутствует провал эффективности, связанный с K краем поглощения Ge или AsGa, так как, фотоны в заданном диапазоне энергий в основном поглощаются кремниевым детектором (см. Рис. 3.25) и вероятность их регистрации в Ge детекторе крайне мала;

- снижена вероятность регистрации фотонов в «горбе потерь», что объясняется малой толщиной кремниевого детектора, большинство фотонов больших энергий (более 40 и 60 кэВ) проходят кремниевый детектор без взаимодействия, при этом следует учесть, что часть комптоновских фотонов может быть поглощена парным детектором, например: фотон возникший в результате комптоновского рассеяния внутри кремниевого детектора может быть поглощен в активном объеме германиевого детектора и т.п.;

- интенсивность пиков K - потерь Ge или As и Ga для комбинированного детектора на несколько порядков ниже, чем для Ge- или AsGa- однослойного детектора, что связано с меньшим выходом флуоресценции для Si части комбинированного детектора, а также процессов одновременной регистрации сигналов с двух компонентов комбинированного детектора и их последующего учета;

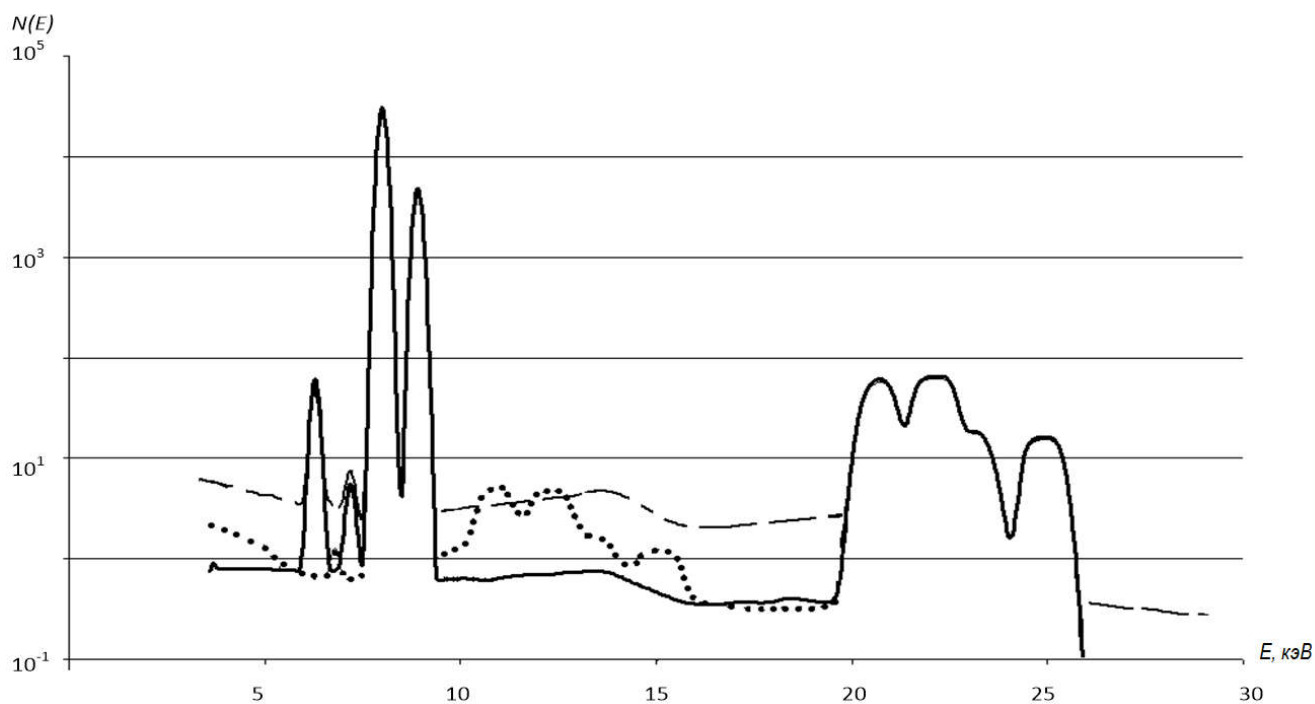


Рис. 3.27. Расчетный уровень сигнала и фона для Cu образца . Пунктирная линия - Si-детектор (толщиной 5 мм); точечная линия – Ge детектор (толщина 5 мм); непрерывная линия – комбинированный детектор Si-Ge (толщина Si-детектора 0.5 мм , толщина Ge-детектора 5 мм). Источник излучения – ^{109}Cd .

На рисунке 3.27 представлен расчетный спектр сигнала и фона при облучении медного образца излучением источника ^{109}Cd и регистрации излучения с помощью однослойных Si-, Ge- и комбинированного Si-Ge- детектора. Рисунок свидетельствует, что в области 2-20 кэВ для Si- детектора наблюдается повышение фона вследствие регистрации рассеянного первичного излучения радиоизотопного источника (линия 88 кэВ ^{109}Cd), и зарегистрированного детектором в «горбе» потерь, при использовании Ge- детектора существенный вклад в области энергий 10-15 кэВ обеспечивается регистрацией в пиках потерь излучения, когерентно и некогерентно рассеянного образцом (линии 22,1 кэВ и 24,8 кэВ источника ^{109}Cd). При этом в данных условиях комбинированный детектор показывает значительно более низкий уровень фона и большую эффективность по сравнению с Si – детектором, вследствие более низкой вероятности регистрации высокоэнергетического излучения в «горбе» потерь, а также по сравнению с Ge – детектором вследствие более низкой вероятности регистрации в «пиках» потерь [150].

3.3 Выводы по главе.

В главе показаны физико-математические модели, позволяющие с использованием метода Монте Карло производить расчет функции отклика полупроводникового детектора с учетом радиационных потерь в результате выхода фотонов из чувствительной области детектора после процесса фотопоглощения и комптоновского рассеяния, выхода электронов высоких энергий за пределы чувствительной зоны детектора.

Предложена модель учета «мертвого слоя» для расчета функции отклика Si(Li) полупроводникового детектора, оценено влияние толщины «мертвого слоя» на функцию отклика. Показано, что при снижении его толщины до $0.1\mu\text{m}$ и менее вклад «мертвого слоя» становится соизмеримым с вкладом выхода электронов высоких энергий из чувствительной области детектора. Сравнение расчетных амплитудных спектров Si(Li) детектора, учитывающих и не учитывающих «мертвый» слой, с экспериментальными данными для случая облучения радиоизотопным источником ^{241}Am свидетельствует о приемлемом качестве предложенной модели.

Предложена физико-математическая модель двухслойного комбинированного полупроводникового детектора, обладающего лучшими свойствами, нежели одиночные детекторы на базе Si(Li) или Ge. Использование комбинированного детектора позволит значительно снизить вклад фонового излучения, при регистрации сигнала, и тем самым улучшить соотношение сигнал/фон по сравнению с традиционными схемами.

Глава 4. Оценка влияния геометрических особенностей энергодисперсионного спектрометра на формирование сигнала и фона при учете многократного рассеяния.

4.1 Описание модели

В рамках усовершенствования моделей работ [7,8] предложен иной подход к расчету геометрического фактора и амплитудного спектра излучения, учитывающий процессы многократного взаимодействия в системе источник-образец-детектор, основанный на методе Монте-Карло.

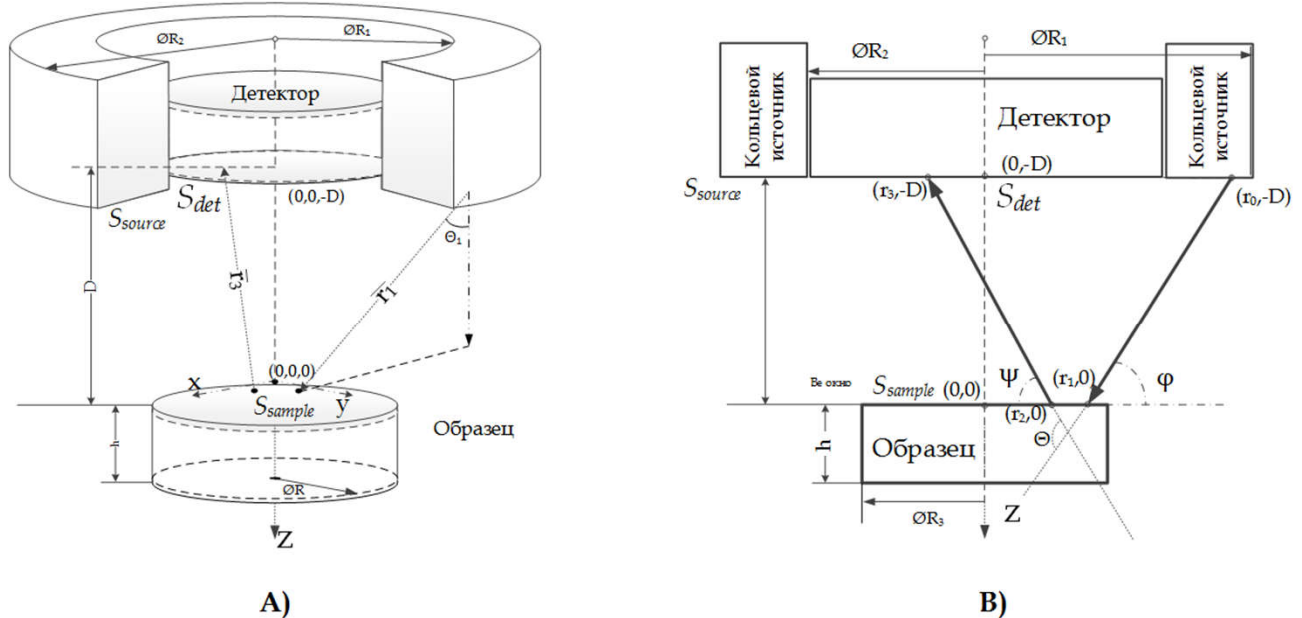


Рис. 4.1. К расчету геометрического фактора.

А) модель спектрометра;

В) углы падения первичного излучения и отбора флуоресцентного излучения.

На рисунке 4.1 представлена геометрическая модель энергодисперсионного спектрометра с возбуждением от кольцевого радиоактивного источника первичного излучения. В качестве основы для расчетов были взяты результаты и модели, представленные в работах [8,122,130,142]. Но в отличие от этих работ, где осуществляется только геометрическое моделирование разброса углов рассеяния первичного излучения с вычислением геометрического фактора $\frac{dG(\Theta)}{d\Theta}$, предлагаемая модель имеет следующие

существенные отличия: производится моделирование первичного излучения и его пространственного распределения; производится моделирование процессов взаимодействия первичного излучения с веществом образца, рассмотрены многократные процессы; рассмотрено пространственное и угловое распределение фотонов, покидающих образец и попадающих в детектор [31].

Моделирование состоит из следующих основных этапов:

- расчет спектра и углового распределения источника первичного излучения;
- расчет процессов переноса энергии внутри образца;
- расчет процессов взаимодействия флуоресцентного и рассеянного излучения образца с веществом детектора с учетом отклика детектора.

Геометрическая модель спектрометра имеет следующие особенности [31]:

- образец, представляет собой цилиндр высотой h и радиусом R , плоскость верхней грани и ось симметрии проходит через начало координат $(0,0,0)$;
- кольцевой источник имеет внутренний радиус R_1 , внешний радиус R_2 и высоту h_{ring} , расположен на удалении D от плоскости образца;
- детектор представляет собой цилиндр с радиусом R_2 и высотой h_{ring} , совмещенный с источником излучения.

Пространство между элементами представленной модели спектрометра заполнено воздухом, под таким давлением, при котором длина свободного пробега рентгеновского фотона, много больше, расстояний между детектором, образцом D или источником.

Расчет спектрального распределения первичного излучения кольцевого источника, имеет ряд особенностей [31]:

- используются экспериментальные данные по радиоактивному источнику ^{241}Am , согласно работе [8];

- излучение первичного фотона происходит непосредственно на поверхности источника и направлено в сторону образца, координаты этой точки лежат в диапазоне

$[R_1 \dots R_2]$, следовательно координаты $x = |R_2 - R_1| \cdot random \cdot \cos(\alpha)$ и

$y = |R_2 - R_1| \cdot random \cdot \sin(\alpha)$ лежат в плоскости XY поверхности источника, α - случайный угол в диапазоне 0 до 2π .

Рентгеновский фотон покидает поверхность источника в направлении вектора \vec{r}_1 и затем попадает в вещество образца, фотоны не попавшие в образец не учитываются. В процессе взаимодействия с веществом образца, возникает флуоресцентный либо рассеянный фотон, который либо полностью поглощается образцом, либо покидает его в направлении r_2 , а затем детектируется [31].

Расчет основан на многократном моделировании событий генерирования первичного фотона источника излучения, взаимодействия первичного фотона с веществом образца и регистрации рассеянного и флуоресцентного рентгеновского фотона детектором. Дополнительно производится моделирование положения точки входа на поверхности образца вектора r_1 и его полярного, а также азимутального углов [31]. На этом этапе моделируется функция распределение угла падения φ , представленная на рис 4.2.

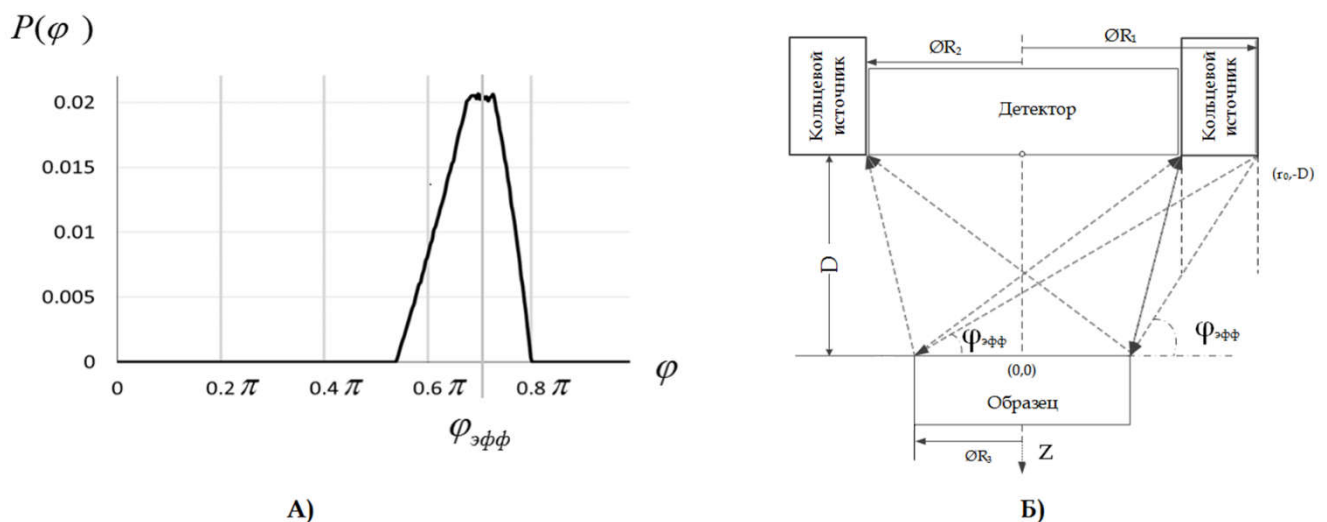


Рис. 4.2. А) $P(\varphi)$ – функция распределения первичных фотонов, покинувших поверхность источника излучения в направлении образца

Б) геометрическое пояснение угла $\varphi_{эфф}$.

В процессе моделирования взаимодействия первичного рентгеновского фотона с веществом образца, производится расчет траектории его движения в активном объеме образца, «потери» энергии в процессе актов некогерентного рассеяния и фотопоглощения.

Вероятности процессов когерентного и некогерентного рассеяния, фотопоглощения описываются согласно выражениями (3.2), (3.3) и (3.4).

Флуоресцентное и/или рассеянное излучение, покидающее активный объем образца, попадает в детектор рентгеновского излучения, либо покидает рабочий объем спектрометра.

На рис. 4.3 представлена функция распределения азимутального угла фотонов, покидающих образец.

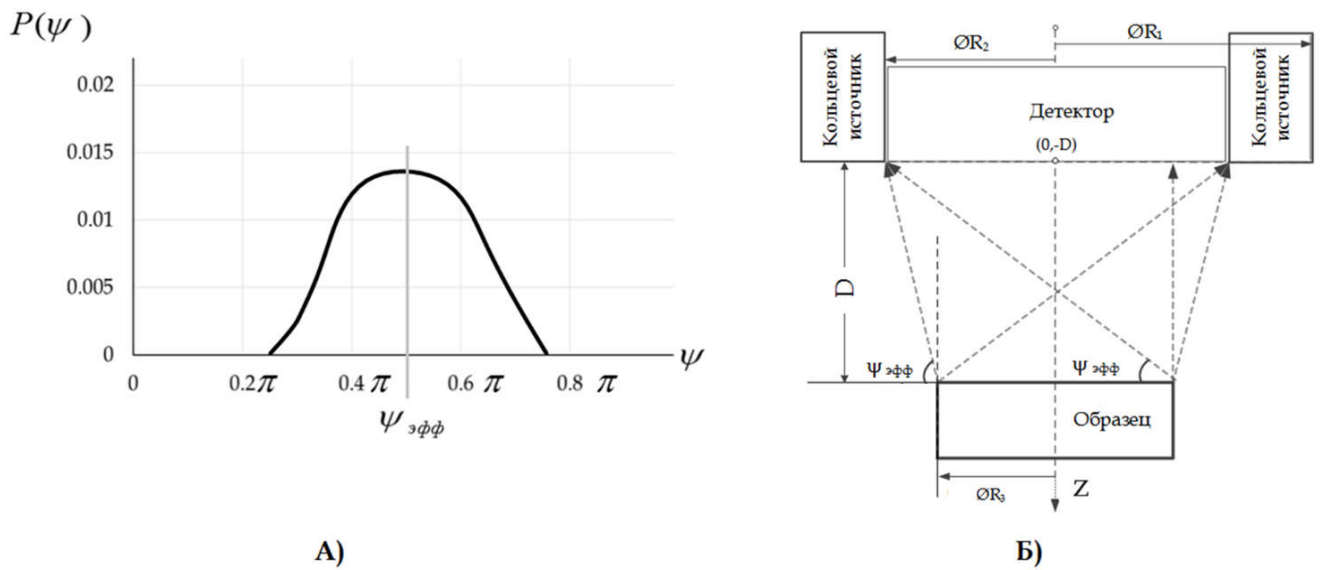


Рис. 4.3. А) $P(\psi_{эфф})$ – функция распределения азимутального угла рассеянных и флуоресцентных фотонов, покинувших образец и зарегистрированных в детекторе;

Б) геометрическое пояснение угла $\psi_{эфф}$.

На рисунке 4.4 представлено сравнение результатов расчета геометрического фактора, как распределения углов однократного рассеяния в сравнении с результатами работы [8]. Как видно из этого рисунка, модель, рассчитанная аналитическим методом, и модель, полученная моделированием методом Монте-Карло спектрометра различаются незначительно.

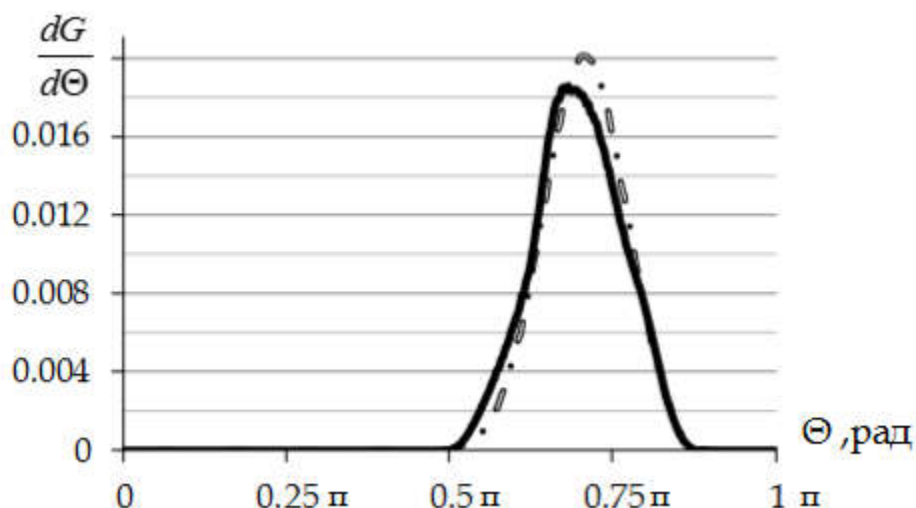


Рис. 4.4. Функция плотности вероятности углового распределения $P(\Theta)$ (сплошная жирная линия) для падающего и выходящего из образца излучения. Расчеты данной работы (штрих – пунктирная линия) и работы [8] (жирная линия).

Полученные распределения нормированы: $\int_0^{2\pi} P(\theta)d\theta = 1$, это определяется тем, что вероятность сложного процесса излучения источником взаимодействия с веществом образца регистрации – низкая, следовательно в модели рассматриваются отдельно угловые распределения для углов на каждом из этапов моделирования. Распределение угла однократного рассеяния определяется математической сверткой отдельных распределений:

$$P(\Theta) = P(\psi) * P(\varphi) = \int_0^{2\pi} P(\psi - \varphi)P(\varphi)d\varphi \quad (4.1)$$

Для расчета амплитудного спектра флуоресцентного используются алгоритмы представленные в Главе 3. Рассеянный и/или флуоресцентный рентгеновский фотон образца попавший в активный объем детектора может быть полностью поглощен в результате единичного акта взаимодействия или каскада взаимодействий. В случае, если фотон покидает пределы активного объема детектора в процессе взаимодействия, то этот фотон будет зарегистрирован в артефактах функции отклика детектора. Аналогично к артефактам функции отклика детектора приводит неполный сбор заряда в случае

регистрации фотона в приповерхностном «мертвом» слое. В качестве детектора использовался Si(Li) полупроводниковый детектор.

4.2 Сопоставление результатов расчета и эксперимента

Полученные в процессе моделирования амплитудные спектры были сопоставлены с результатами расчетов и экспериментальными данными работы [8]. На рис 4.5 представлены результаты расчетов амплитудного спектра и сравнение их с экспериментальными данными для медного образца при возбуждении радиоизотопным источником ^{241}Am (графики совмещены по максимумам флуоресцентных линий $\text{Cu K}\alpha$).

Сравнение экспериментальных и расчетных данных [8] с результатами настоящей работы в области энергий 48-60 кэВ, где спектр характеризуется наличием вклада одно- и двукратных процессов комптоновского рассеяния образцом, наблюдается значительное улучшение точности описания амплитудного спектра за счет рассмотрения многократных процессов. Погрешность описания спектра в этой области составляет $\pm 10\%$.

В областях энергий 40-48 кэВ вклад многократного комптоновского рассеяния дает достаточно высокий уровень фона, поэтому результат настоящей модели, показывает лучшее согласие с экспериментальными данными по сравнению с работой [8]. Но при этом следует отметить, что погрешность описания фона остается высокой. Вероятными причинами этого могут являться погрешности задания дифференциальных сечений рассеяния, см., например, [34], либо необходим дополнительный учет рассеяния первичного и флуоресцентного излучения на деталях спектрометра.

Для диапазона энергий от 15 кэВ до 40 кэВ разница может достигать порядка, что, вероятно, объясняется неточностью модели описания спектра первичного излучения радиоактивного источника ^{241}Am .

В области малых энергий (до 10 кэВ) наличие погрешности описания расчетного спектра объясняется неточностью дифференциальных сечений когерентного и некогерентного рассеяния, а также неточностями в моделировании функции отклика детектора [31,156].

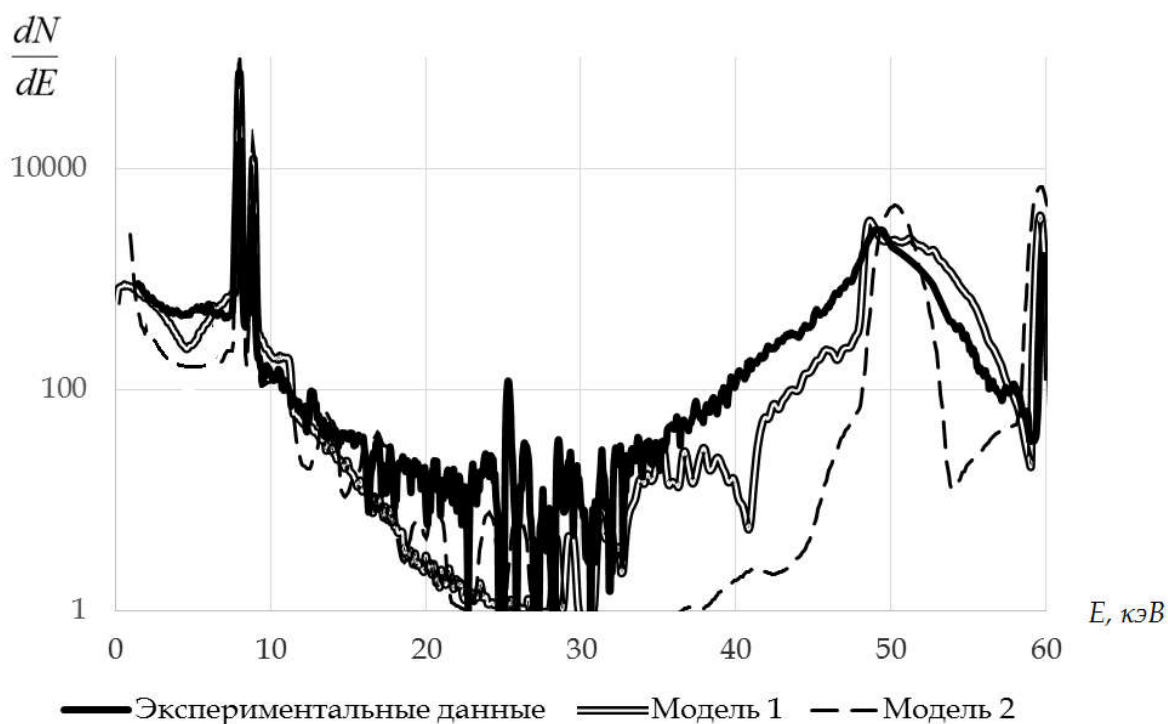


Рис. 4.5. Сравнение экспериментальных данных с расчетами выполненными в рамках данной работы (*модель 1*) и в рамках расчетных данных работы [8] (*модель 2*) (источник ^{241}Am , образец Cu)

4.3 Вывод по главе

Проведено моделирование геометрического фактора с учетом процессов многократного рассеяния для энергодисперсионного спектрометра. Предложена методика расчета амплитудного спектра флуоресцентного излучения, учитывающая многократные процессы в образце, а также геометрические особенности энергодисперсионного спектрометра, которая позволяет существенно уменьшить неопределенность фона в области пика некогерентного рассеяния первичного излучения и улучшить согласие экспериментальных и расчетных данных по сравнению с моделями, учитывающими только однократные процессы. Тем не менее, представленные расчеты указывают на необходимость учета взаимодействия первичного и флуоресцентного излучения с деталями спектрометра, а также уточнения сведений о дифференциальных сечениях рассеяния. При всей сложности оценки практической значимости данных расчетов, результаты работы помогают в понимании механизмов формирования фонового сигнала и его дальнейшего учета, и поиска методов улучшения соотношения сигнал/фон.

Заключение

Исследования, выполненные в рамках настоящей работы, позволили в существенной мере изменить наше представление о формировании фона в рентгенофлуоресцентной аппаратуре с волновой и энергетической регистрацией аналитического сигнала.

Полученные результаты сводятся к следующему:

1. Произведены теоретические расчеты и экспериментальные исследования вклада тормозного излучения фото-, Оже и комптоновских электронов рентгеновского спектра в области флуоресценции элементов с малым атомным номером ($Z \leq 11$) для аппаратуры с волновой дисперсией. Показано, что при некоторой длине волны, вклад рассеянного излучения рентгеновской трубки становится незначительным, по сравнению с вкладом свободных электронов, и зависит от толщины выходного Be окна. При толщине выходного окна 75 мкм эта граница расположена в области 10 – 11 Å. Разработана статистическая модель формирования фона, учитывавшая тормозное излучение свободных электронов. Хорошее согласие результатов расчета и эксперимента, выполненного для *NaKα* канала спектрометра СРМ-25, подтверждает значимость вклада тормозного излучения свободных электронов в процесс формирования фона, и их корреляцию с элементным составом анализируемого объекта.

2. Предложена модель учета «мертвого слоя» для расчета функции отклика Si(Li) полупроводникового детектора, оценено влияние толщины «мертвого слоя» на функцию отклика. Показано, что при снижении его толщины до 0.1 μm и менее вклад «мертвого слоя» становится соизмеримым с вкладом выхода электронов высоких энергий из чувствительной области детектора. Сравнение расчетных амплитудных спектров Si(Li) детектора, учитывающих и не учитывающих «мертвый» слой, с экспериментальными данными для случая облучения радиоизотопным источником ^{241}Am свидетельствует о приемлемом качестве предложенной модели.

3. Предложена физико-математическая модель двухслойного комбинированного полупроводникового детектора, обладающего лучшими свойствами, нежели одиночные Si(Li) или Ge детекторы. Использование комбинированного детектора позволит

значительно снизить вклад фонового излучения, при регистрации сигнала, и тем самым улучшить соотношение сигнал/фон по сравнению с традиционными схемами.

4. Предложена методика расчета амплитудного спектра флуоресцентного излучения, учитывающая многократные процессы в образце, а также геометрические особенности энергодисперсионного спектрометра, которая позволяет существенно уменьшить неопределенность фона в области пика некогерентного рассеяния первичного излучения и улучшить согласие экспериментальных и расчетных данных по сравнению с моделями, учитывающими только однократные процессы.

Результаты данной работы могут быть использованы для совершенствования рентгенофлуоресцентной аппаратуры, оптимизации узлов детектирования и геометрических параметров, а также для эффективной оценки вкладов различных факторов в фоновой сигнал.

Список публикаций по теме диссертации.

1. An estimation of EDXRF spectrometer properties, based on a two-layer composite Si-Ge detector / A. Yu. Portnoy, G. V. Pavlinsky, **M. S. Gorbunov**, Yu. I. Sidorova // X-ray spectrometry. – 2012. – V. 41, № 5. – P. 298-303 (DOI: 10.1002/xrs.2396).
2. Pavlinsky, G. V. Contribution of bremsstrahlung of free electrons to formation of the background component for NaK α X-ray fluorescence / G. V. Pavlinsky, **M. S. Gorbunov**, L. I. Vladimirova // X-Ray Spectrometry. – 2012. – T. 41, № 4. – С. 247-252.
3. Pavlinsky, G. V. X-ray Radiation Arising in Free Electron/Substance Interaction / G. V. Pavlinsky, A. Yu. Dukhanin, **M. S. Gorbunov** // Radiation physics research progress / ed. by Aidan N. Camilleri. – New York, 2008. – P. 301-328.
4. Portnoy, A. Yu. An estimation of the signal to background ratio limited by photon and electron transport in EDXRF / A. Yu. Portnoy, G. V. Pavlinsky, **M. S. Gorbunov** // X-ray spectrometry. – 2010. – V. 39, № 1. – P. 41-51.
5. **Горбунов, М. С.** Длинноволновое тормозное излучение свободных электронов, возникающих в облучаемом материале / М. С. Горбунов, Г. В. Павлинский // Тезисы докладов XVIII Уральской конференции по спектроскопии. – Новоуральск, 2007. – С. 90-91.
6. **Горбунов, М. С.** Оценка влияния геометрии EDXRF спектрометра на форму спектра при учете многократного рассеяния / М. С. Горбунов, А. Ю. Портной, Г. В. Павлинский // Тезисы докладов VIII Всероссийской конференции по рентгеноспектральному анализу. – Иркутск, 2014. – С. .
7. **Горбунов, М. С.,** Оценка влияния геометрии энергодисперсионного рентгеновского флуоресцентного спектрометра на форму спектра при учете многократного рассеяния / М. С. Горбунов, А. Ю. Портной, Г. В. Павлинский // Научное приборостроение. – 2014. – Т. 24, № 3. – С. 16-21.
8. Комбинированный полупроводниковый детектор рентгеновского излучения: пат. 2413244 Рос. Федерация: МПК G01T 1/24 (2006.01) / А. Ю. Портной, Г. В. Павлинский, **М. С. Горбунов** ; заявитель и патентообладатель ГОУ ВПО Иркутский гос. ун-т путей сообщения (ИрГУПС (ИрИИТ)). – № 2009118070/28 ; заявл. 12.05.2009 ; опубл. 27.02.2011, Бюл. № 6. – [10 с.].
9. Об оптимизации соотношения сигнал/фон в энергодисперсионном рентгенофлуоресцентном анализе / А. Ю. Портной, Г. В. Павлинский, **М. С. Горбунов**, П. Зузаан, Б. Эрдемчимег // Журнал аналитической химии. – 2009. – Т. 64, № 5. – С. 511-520.
10. Об особенностях фона, обусловленных переносом и сбором электронов в Si детекторе / А. Ю. Портной, Г. В. Павлинский, **М. С. Горбунов**, Ю. И. Сидорова // Научное приборостроение. – 2011. – Т. 21, № 4. – С. 145-150.

11. Об оценке свойств энергодисперсионного спектрометра на базе многослойных комбинированных детекторов / А. Ю. Портной, Г. В. Павлинский, **М. С. Горбунов**, Ю. И. Сидорова // Тезисы докладов VII Всероссийской конференции по рентгеноспектральному анализу. – Новосибирск, 2011. – С. .
12. Оценка возможности оптимизации соотношения сигнал/фон в энергодисперсионном рентгенофлуоресцентном анализе / А. Ю. Портной, Г. В. Павлинский, **М. С. Горбунов**, Е. О. Баранов // Тезисы докладов V Всероссийской конференции по рентгеноспектральному анализу. – Иркутск, 2006. – С. 72.
13. Оценка свойств рентгеновского флуоресцентного энергодисперсионного спектрометра на основе двухслойного комбинированного детектора / А. Ю. Портной, Г. В. Павлинский, **М. С. Горбунов**, Ю. И. Сидорова // Журнал аналитической химии. – 2012. – Т. 67, № 3. – С. 274.
14. Павлинский, Г. В. О формировании фоновой составляющей аналитического сигнала в длинноволновой области рентгеновского спектра флуоресценции / Г. В. Павлинский, **М. С. Горбунов**, Л. И. Владимирова // Журнал аналитической химии. – 2012. – Т. 67, № 3. – С. 265.
15. Павлинский, Г. В. Об оптимизации соотношения сигнал/фон в энергодисперсионном рентгенофлуоресцентном анализе / Г. В. Павлинский, **М. С. Горбунов**, Е. О. Баранов // Тезисы докладов VI Всероссийской конференции по рентгеноспектральному анализу. – Краснодар, 2008. – С.102.
16. Павлинский, Г. В. Соотношение интенсивностей тормозного излучения фото-, Оже- и комптоновских электронов, возникающих в облучаемом материале / Г. В. Павлинский, **М. С. Горбунов**, А. Ю. Портной // Тезисы докладов V Всероссийской конференции по рентгеноспектральному анализу. – Иркутск, 2006. – С. 90.
17. Павлинский, Г. В. Тормозное излучение свободных электронов, возникающих в облучаемом образце / Г. В. Павлинский, **М. С. Горбунов**, А. Ю. Портной // Известия высших учебных заведений. Физика. – 2009. – № 7. – С. 25-32.
18. Павлинский, Г. В. Тормозное излучение фото-, Оже и Комптоновских электронов – составляющая фона в длинноволновой области рентгеновской флуоресценции / Г. В. Павлинский, **М. С. Горбунов**, А. Ю. Портной // Тезисы докладов «Conference on X-Ray Analysis for 30th Anniversary of XRF Analysis in Mongolia» (2006). – Улан-Батор, 2006. – С.16.
19. Портной, А. Ю. Метод оценки энергетических и пространственных параметров рентгеновских и гамма детекторов в области энергий до 1 МэВ / А. Ю. Портной, Г. В. Павлинский, **М. С. Горбунов** // Тезисы докладов конференции «Неразрушающий контроль и диагностика». – Томск, 2008. – С. 110.

20. Портной, А. Ю. Об оценке свойств комбинированного двухслойного рентгеновского детектора / А. Ю. Портной, Г. В. Павлинский, **М. С. Горбунов** // Научное приборостроение. – 2010. – Т. 20. – С. 39-45.

21. Свойства двухслойных комбинированных детекторов и рентгеновских флуоресцентных энергодисперсионных спектрометров на их основе / А. Ю. Портной, Г. В. Павлинский, **М. С. Горбунов**, Ю. И. Сидорова // Научное приборостроение. – 2012. – Т. 22, № 1. – С. 25-35.

Список литературы

1 Исследование состава фона в коротковолновой области рентгеновского спектра флуоресценции / Б. Л. Сухоруков [и др.] // Журнал аналитической химии. – 1975. – Т. 30, № 2. – С. 372-375.

2 Павлинский, Г. В. Формирование фона в кристалл-дифракционной аппаратуре в длинноволновой области рентгеновского спектра / Г. В. Павлинский, Н. Н. Имешкенова, Д. В. Ившев // Журнал аналитической химии. – 1991. – Т. 46, №3 – С. 525-531.

3 О рентгеновском фоне в длинноволновой области спектра / А. Г. Ревенко [и др.] // Зав. лаб. – 1970. – Т. 36, № 2. – С. 166-169.

4 Ревенко, А. Г. Рентгеноспектральный флуоресцентный анализ природных материалов / А. Г. Ревенко. – Н.: Наука, 1994. – 263 с.

5 Fernández, J. E. Effects of the x-ray scattering anisotropy on the diffusion of photons in the frame of the transport theory / J. E. Fernández, V. G. Molinari, M. Sumini // Nuclear Instruments and Methods In Physics Research. – 1989. – A 280. – P. 212-221.

6 Fernández, J. E. Polarization effects and photon transport in x-ray spectrometry / J. E. Fernández // X-ray spectrometry. – 1995. – V. 24. – P. 283-292.

7 Белых, В. В. Многократно рассеянное излучение при рентгенорадиометрическом методе анализе / В. В. Белых, А. Н. Смагунова, В. А. Козлов // Журнал аналитической химии. – 1994. – Т. 49, № 10. – С. 1092-1096.

8 Формирование аналитического сигнала и фона в флуоресцентном рентгенорадиометрическом анализе при использовании радиоактивного источника ^{241}Am и Si(Li) детектора / А. Ю. Портной [и др.] // Журнал аналитической химии. – 2004. – Т. 59, № 11. – С. 1171-1180.

9 Encyclopedia of Analytical Chemistry / R. A. Meyers [et al.]. – Chichester, 2000. – P. 13269-13288.

10 Рентгенофлуоресцентный анализ / В. П. Афонин [и др.]. – Новосибирск: Наука, 1991. – 173 с.

-
- 11 Блохин, М. А. Физика рентгеновских лучей / М. А. Блохин. – М.: ГИТТЛ, 1957. – 518 с.
- 12 Handbook of X-Ray Spectrometry / R. Van Grieken [et al.]. – NY: Marcel Dekker, 2002. – 985 p.
- 13 Гуничева, Т. Н. Учет фона при анализе на многоканальных рентгенофлуоресцентных спектрометрах / Т. Н. Гуничева, В. П. Афонин, А. Л. Финкельштейн // Журнал аналитической химии. – 1982, Т. 7. – С. 1157-1162.
- 14 Вустер, У. Диффузное рассеяние рентгеновских лучей в кристаллах: пер. с англ. / У. Вустер. – М.: ИЛ, 1963. – 283 с.
- 15 Павлинский, Г. В. Расчет соотношения рассеянного пробой первичного и возникшего в ней тормозного излучения фото и оже электронов / Г. В. Павлинский, Н. Н. Имешкенова, Д. В. Ившев // АМРА. – 1991. – С. 113-119.
- 16 Павлинский, Г. В. Соотношение интенсивностей тормозного излучения фото-, Оже- и комптоновских электронов, возникающих в облучаемом материале / Г. В. Павлинский, М. С. Горбунов, А. Ю. Портной // Тезисы докладов V Всероссийской конференции по рентгеноспектральному анализу. – Иркутск, 2006. – С. 90.
- 17 Павлинский, Г. В. Тормозное излучение свободных электронов, возникающих в облучаемом образце / Г. В. Павлинский, М. С. Горбунов, А. Ю. Портной // Известия высших учебных заведений. Физика. – 2009. – № 7. – С. 25-32.
- 18 Decomposition of Wavelength Dispersive X-Ray Spectra / G. Remond [et al.] // J. Res. Natl. Inst. Stand. Technol. – 2002. – V. 107. – P. 509-529.
- 19 Исследование процессов образования фона в длинноволновой области спектра / Е. В. Чупарина, А. Н. Смагунова, Л. А. Елисеева // Журнал аналитической химии. – 2015. – Т. 70, № 8. – С. 828-834.
- 20 Pavlinsky, G. V. Calculation of Photo- and Auger Electron Contribution to X-Ray Fluorescence Excitation of Elements with Low Atomic Number / G. V. Pavlinsky, A. Ju. Dukhanin // X-Ray Spectrometry. – 1994. – V. 23. – P. 221-228.

21 Influence of photo and Auger electrons of the elements with high atomic numbers on formation of x-ray carbon fluorescence intensity / A. Ju. Dukhanin [et al.] // X-Ray Spectrometry. – 2006. – V. 35, № 1. – P. 34-39.

22 Афонин, В. П. Рентгенофлуоресцентный силикатный анализ / В. П. Афонин, Т. Н. Гуничева, Л. Ф. Пискунова. – Новосибирск: Наука, 1984. – 227 с.

23 Quantitative X-ray Spectrometry / R. Jenkins [et al.]. – 2nd ed. – NY: Marcel Dekker, 1995. – 484 p.

24 Жуковский, А. Н. Высокочувствительный рентгенофлуоресцентный анализ с полупроводниковыми детекторами / А. Н. Жуковский, Г. А. Пшеничный, А. В. Мейер. – М.: Энергоатомиздат, 1991. – 160 с.

25 Прикладная спектрометрия с полупроводниковыми детекторами / С. А. Балдин [и др.]. – М.: Атомиздат, 1974. – 320 с.

26 Гамма спектрометр на основе сегментированного детектора из особо чистого германия с подавлением фона / В. В. Кондратьев [и др.] // Приборы и техника эксперимента. – 2002. – № 4. – С. 130.

27 Павлинский, Г. В. Основы физики рентгеновского излучения / Г. В. Павлинский. – М.: Физматлит, 2007. – 240 с.

28 Fernández, J. E. Rayleigh and Compton scattering Contributions to X-Ray Fluorescence Intensity / J. E. Fernández // X-Ray Spectrometry. – 1992. – V. 21. – P. 57-68.

29 Polarization effects on multiple gamma transport / J. E. Fernández [et al.] // Radiation Physics Chemistry. – 1993. – V. 41. – P. 579-630.

30 Fernández, J. E. Vector Monte Carlo For Simulation of polarized photons / J. E. Fernández, M. Bastiano, A. Tartari // X-Ray Spectrometry. – 1998. – V. 25. – P. 325-331.

31 Горбунов, М. С. Оценка влияния геометрии энергодисперсионного рентгеновского флуоресцентного спектрометра на форму спектра при учете многократного рассеяния / М. С. Горбунов, А. Ю. Портной, Г. В. Павлинский // Научное приборостроение. – 2014. – Т. 24, № 3. – С. 16-21.

32 Fernandez, J. E. Analysis of the effects of geometry on the fluorescence radiation field in the frame of transport theory / J. E. Fernandez, V. G. Molinari, F. Teodori // X-Ray Spectrometry. – 2005. – V. 34, № 1. – P. 7-10.

33 Als-Nielsen, J. Elements of modern X-ray physics / J. Als-Nielsen, D. McMorrow. – Chichester: John Wiley&Sons, 2001. – 318 p.

34 Финкельштейн, А. Л. Аппроксимации коэффициентов ослабления рентгеновского излучения в области 0,1-100 кэВ / А. Л. Финкельштейн, П. М. Фарков // Аналитика и контроль. – 2002. – Т. 6, № 4. – С. 377-382.

35 Маренков, О. С. Таблицы и формулы рентгеноспектрального анализа. Методические рекомендации / О. С. Маренков. – Л.: Машиностроение, 1982 – 101 с.

36 Leroux, J. Method for finding mass-absorption coefficients by empirical equation and graphs / J. Leroux // Adv. X-ray analysis. – 1961. – V. 5. – P. 153-160.

37 Tinh, T. P. New basic empirical equation for computing of X-ray mass attenuation coefficients / T. P. Tinh, J. Leroux // X-ray spectrometry. – 1979. – V.9, № 2. – P. 85-91.

38 Heinrich, K. F. J. X-ray absorption uncertainty / K. F. J. Heinrich // The electron microprobe. – N.Y., 1966. – P. 131-177.

39 Hubbell, J. H. Compilation of photon cross sections: some historical remarks and current status / J. H. Hubbell // X-ray spectrometry. – 1999. – V. 28, № 4. – P. 215-223.

40 Creagh D.C., Hubbell J.H. Problems associated with measurement of X-ray attenuation coefficients. I. Silicon. Report on the international union of crystallography X-ray attenuation project. // Acta Cryst. — 1987. — A43. — P. 102-112.

41 Creagh, D. C. Problems associated with measurement of X-ray attenuation coefficients. II. Carbon. Report on the international union of crystallography X-ray attenuation project / D. C. Creagh, J. H. Hubbell // Acta Cryst. – 1990. – A 46. – P. 402-408.

42 Hubbell J.H. and Seltzer S.M. Tables of x-ray mass attenuation coefficients and mass energy – absorption coefficients 1 keV to 20 MeV for elements Z = 1 to 92 and 48 additional substances of dosimetric interest / J. H. Hubbell, S. M. Seltzer // NISTIR 5632. – 1995.

-
- 43 Блохин, М. А. Рентгеноспектральный справочник / М. А. Блохин, И. Г. Швейцер. – М.: Наука, 1982. – 376 с.
- 44 Бахтиаров, А. В. Рентгеноспектральный флуоресцентный анализ в геологии и геохимии / А. В. Бахтиаров. – Л.: Недра, 1985. – 144 с.
- 45 Thomson, J. J. The Conduction of electricity through gases / J. J. Thomson. – London: Cambridge University Press, 1906. – 325 p.
- 46 Atomic Form Factors, Incoherent Scattering Functions, and Photon Scattering Cross Sections / J. H. Hubbell [et al.] // J. Phys. Chem. Ref. Data. – 1975. – V. 4, № 3. – P. 471-538.
- 47 Brown, R.T. Coherent and incoherent x-ray scattering by bound electrons / R. T. Brown // Phys. Rev. – 1970. – A 1. – P. 1342-1347; A 2. – P. 614-620.
- 48 Brown, R. T. Coherent and incoherent scattering by bound electrons. III. Five-electrons atoms / R. T. Brown // Phys. Rev. – 1974. – A 10. – P. 438-439.
- 49 Cromer, D. T. X-ray scattering factors computed from numerical Hartree-Fock wave functions / D. T. Cromer // Acta crystallogr. – 1968. – A 24. – P. 321-324.
- 50 Бахтиаров, А. В. Формулы для приближенного вычисления дифференциальных сечений рассеяния рентгеновского излучения малой энергии / А. В. Бахтиаров, Г. А. Пшеничный // Аппаратура и методы рентгеновского анализа. – Л., 1973. – Вып. 12. – С. 68-72.
- 51 Kissel, L. Reyleigh scattering by neutral atomic, 100 eV to 10 MeV / L. Kissel, R. H. Pratt, S. C. Roy // Phys. Rev. – 1980. – A 22. – P. 1970-2004.
- 52 Compton, A. H. A quantum theory of the scattering of X-rays by light elements / A. H. Compton // Phys. Rev. Second series. – 1923. – V. 21 (5). – P. 483-502.
- 53 Комптон, А. Х. Рентгеновские лучи. Теория и эксперимент / А. Х. Комптон, С. К. Алисон. – Л.: Гостехиздат, 1941. – 672 с.
- 54 Klein, O. Uber die Streuung von Strahlen durch freie Electron nach der neuen relativistischen Quantendynamic von Dirac / O. Klein, Y. Nishina // Z. Physik. – 1929. – V. 52. – P. 853-868.

55. Şimşek, Ö. Inelastic and elastic scattering differential cross-sections of 59.5 keV photons for Cu and Zn targets / Ö. Şimşek [et al.] // X-ray spectrometry. – 2004. – V. 33, № 5. – P. 249-253.

56 Hubbell, J. H. An examination of available incoherent scattering S-matrix theory, also Compton profile information, and their impact on photon attenuation coefficient compilations / J. H. Hubbell // NISTIR 6358. – 1999.

57 Suric, T. Compton scattering of photons by inner –shell electrons / T. Suric [et al.] // Phys. Rev. Lett. – 1991. – V. 67. – P. 189-192.

58 Suric, T. Compton scattering by bound electrons: comparisons of impulse approximation with exact IPA calculations / T. Suric // Nucl. Instr. Meth. – 1992. – A 314. – P. 240-243..

59 Bergstrom, P. M. Inelastic scattering by bound electrons at synchrotron radiation energies / P. M. Bergstrom // Nucl. Instr. Meth. – 1993. – B 79. – P. 240-243.

60 Bergstrom, P. M. An overview of the theories used in Compton scattering calculations / P. M. Bergstrom, R. H. Pratt // Radiat. Phys. Chem. – 1997. – V. 50. – P. 3-29.

61 Ebel, H. Numerical description of photoelectric absorption coefficients for fundamental parameter programs / H. Ebel [et al.] // X-ray spectrometry. – 2003. – V. 32, № 6. – P. 442-451.

62 Рид, С. Электронно-зондовый микроанализ: пер. с англ / С. Рид. – М.: Мир, 1979. – 423 с.

63 Hoefft, H. Investigations towards optimizing EDS analysis by Cliff-Lorimer method in scanning transmission electron microscopy / H. Hoefft, P. Schwaab // X-ray spectrometry. – 1988. – V. 17, № 5. – P. 201-208.

64 Bloh, F. Bremsvermogen von atomen mit mehreren elektronen / F. Bloh // Zeit. Phys. – 1933. – Bd. 81. – P. 363-376.

65 Duncumb, P. Accuracy of atomic number and absorption corrections in electron probe microanalysis / P. Duncumb, P. K. Shields-Mason // Proc. 4th Int. Congr. on X-Ray Optics and Microanalysis. – Berlin, 1969. – P. 146-150.

66 Berger, M. National academy of science, National Research council publ. 1133 / M. Berger, S. Seltzer. – Washington, 1964. – P. 205.

67 Finkelshtein, A. L. Calculation of X-Ray tube spectral distributions / A. L. Finkelshtein, T. O. Pavlova // X-ray spectrometry. – 1999. – V. 28, № 1. – P. 27-32.

68 Лаврентьев, Ю. Г. Второе поколение методов коррекции в рентгеноспектральном микроанализе: аппроксимационные модели функции распределения излучения по глубине / Ю. Г. Лаврентьев, В. Н. Королюк, Л. В. Усова // Журнал аналитической химии. – 2004. – Т. 59, № 7. – С. 678-696.

69 Merlet, C. Accurate description of surface ionization in electron probe microanalysis: an improved formulation / C. Merlet // X-Ray Spectrometry. – 1992. – V. 21, № 5. – P. 229-238.

70 Финкельштейн, А. Л. О расчете спектрального распределения излучения рентгеновских трубок в рентгенофлуоресцентном анализе / А. Л. Финкельштейн, Т. О. Павлова // Заводская лаборатория. – 1996. – Т. 62, № 12. – С. 16-20.

71 Расчет спектрального распределения первичного излучения при рентгенофлуоресцентном анализе / А. Л. Финкельштейн [и др.] // Заводская лаборатория. – 1981. – Т. 47, № 11. – С. 28-31.

72 Поляризованное излучение частиц и атомов / М. Я. Амуся [и др.]. – М.: Наука, 1987. – 335 с.

73 Bethe, H. On the stopping of fast particles and on the creation of positive electrons / H. Bethe, W. Heitler // Proc. of Royal Soc. A. – 1934. – V. 146. – P. 83-112. doi: 10.1098/rspa.1934.0140

74 Борходоев, В. Я. Рентгенофлуоресцентный анализ горных пород способом фундаментальных параметров / В. Я. Борходоев. – Магадан: СВКНИИ ДВО РАН, 1999. – 279 с.

75 Kramers, H. On the theory of X-ray absorption and of the continuous X-ray spectrum / H. Kramers // Phil. Mag. – 1923. – V. 46. – P. 836-871.

76 Павлинский, Г. В. Теоретические основы вычислительного эксперимента в рентгенофлуоресцентном анализе / Г. В. Павлинский // Аппаратура и методы рентгеновского анализа. – СПб, 1992. – Вып. 41. – С. 83.

77 Statham, P. J. The generation, absorption and anisotropy of thick target bremsstrahlung and implications for quantitative energy dispersive analysis / P. J. Statham // X-ray spectrometry. – 1976. – V. 5, № 3. – P. 154-167.

78 Верховцева, Э. Т. Особенности рентгеновского тормозного излучения при рассеянии электронов промежуточных энергий на атомах инертных газов / Э. Т. Верховцева, Е. В. Гнатченко // Физика низких температур. – 2002. – Т. 28, № 4. – С. 388-399.

79 Verkhovtseva, E. T. Pogrebnjak Investigation of the connection between 'giant' resonances and 'atomic' bremsstrahlung / E. T. Verkhovtseva, E. V. Gnatchenko // J. Phys. B: At. Mol. Phys. – 1983. – V. 16, L 613. doi:10.1088/0022-3700/16/20/003

80 Gnatchenko, E. V. Absolute Differential Bremsstrahlung Cross Section for the Scattering of 0.6-keV Electrons by Xenon Atoms / E. V. Gnatchenko, A. A. Tkachenko, A. N. Nechay // JETP Letters. – 2007. – V. 86, № 5. – P. 292-296.

81 Аппаратура и методы рентгеновского анализа : сб. статей ЛНПО «Буревестник». – Л.: Машиностроение. Ленингр. отд-ние, 1980. – Вып. 24. – 232 с.

82 Плотников, Р. И. Флуоресцентный рентгенорадиометрический анализ / Р. И. Плотников, Г. А. Пшеничный. – М.: Атомиздат, 1973. – 264 с.

83 Ebel, H. X-ray tube spectra / H. Ebel // X-Ray spectrometry. – 1999. – V. 28. – P. 255-266.

84 Pestov, A.E. Simulation of the Intensity of X-ray Tube Radiation in Soft X-ray and Extreme UV Regions / A. E. Pestov, N. N. Salashchenko, N. I. Chkhalo // Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics. – 2008. – V. 72, № 2. – P. 201-203.

85 Афонин, В. П. Об оптимальном варианте заземления электродов рентгеновской трубки при рентгеноспектральном анализе элементов с малыми атомными номерами / В. П. Афонин, Н. Ф. Лосев, А. И. Шалагинов // Заводская лаборатория. – 1968. – Т. 34, № 2. – С. 169-172.

86 Arai, T. Measurement of the spectral distribution emitted from spectrographic tubes / T. Arai, T. Shoji, K. Omote // Adv. X-Ray Anal. – 1986. – V. 29. – P. 413-422.

87 Pavlinsky, G. V. Calculating the spectral distribution of radiation from X-ray tube with grounded cathode / G. V. Pavlinsky, A. Ju. Portnoy // Radiation Physics and Chemistry. – 2001. – V. 62, № 2-3. – P. 207-213.

88 Pavlinsky, G. V. Formation features of radiation from X-ray tubes with grounded cathode / G. V. Pavlinsky, A. Ju. Portnoy // X-ray spectrometry. – 2002. – V. 31, № 3. – P. 247-251.

89 Handbook of Practical X-Ray Fluorescence Analysis / B. Beckhoff [et al.]. – Berlin: Springer Berlin Heidelberg, 2006. – 902 p.

90 Development of portable gas proportional scintillation counters for x-ray spectrometry / J. M. F. dos Santos [et al.] // X-ray spectrometry. – 2001. – V. 30, № 6. – P. 373-381.

91 Knoll, G. F. Radiation Detection and Measurement / G. F. Knoll. – 3rd edition. – NY: John Wiley & Sons, 2000. – 802 с.

92 A gas proportional-scintillation counter for x-ray spectrometry in the 0.1 – 3 keV range / F. I. G. M. Borges [et al.] // X-ray spectrometry. – 2004. – V. 33. – P. 124–127.

93 Дирнли, Дж. Полупроводниковые счетчики ядерных излучений / Дж. Дирнли, Д. Нортроп. – М.: Мир, 1966. – 355 с.

94 Медведев, М. Н. Сцинтилляционные детекторы / М. Н. Медведев. – М.: Атомиздат, 1977. – 136 с.

95 Nikl, M. Scintillation detectors for x-rays / M. Nikl // Measurement Science and technology. – 2006. – V. 17. – P. 37-54. doi:10.1088/0957-0233/17/4/R01.

96 Improvements in or relating to a radiation detector comprising a semiconductor device. Patent GB 1278444, 1972.

97 Полупроводниковые детекторы ядерных частиц и их применение / Ю. К. Акимов [и др.]. – М.: Атомиздат, 1967. – 255 с.

98 Акимов, Ю. К. Кремниевые детекторы излучений (обзор) / Ю. К. Акимов // ПТЭ. – 2007. – № 1. – С. 5-34.

99 Киттель, Ч. Введение в физику твёрдого тела / Ч. Киттель. – М.: Наука, 1978. – 791 с.

-
- 100 Бонч-Бруевич, В. Л. Физика полупроводников / В. Л. Бонч-Бруевич, С. Г. Калашников. – М.: Наука, 1977. - 678 с.
- 101 Полупроводниковые детекторы в экспериментальной физике / Ю. К. Акимов [и др.]. – М.: Энергоатомиздат, 1989. – 344 с.
- 102 Tsuji, K. X-Ray Spectrometry: Recent technological advances / K. Tsuji, J. Injuk, R. Van Grieken. – NY: John Wiley & Sons Inc., 2004. – 616 p.
- 103 Composite solid state radiation detector. Патент UK 1233607, 1968 .
- 104 Semiconductor radiation detector. Патент JP63145985(A) , 1988.
- 105 Pair of semiconductor radiation detectors having different atomic numbers and sensitive regions of different thickness. Патент US 3291992, 1966.
- 106 Semiconductor radiation detector. Патент JP63156368(A) , 1988.
- 107 Semiconductor radiation detector. Патент JP62162986(A) , 1987.
- 108 Felsteiner, J. Effect of the electron-momentum distribution on the shape of the Compton edge of Si(Li) detectors / J. Felsteiner, S. Kahane, B. Rosner // Nuclear Instruments and Methods. – 1974. – V. 118. – P. 253-255.
- 109 Keith, H. D. Calibration and use of a 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.
- 110 Lowe, B. G. An analytical description of low-energy X-ray spectra in Si(Li) and HPGe detectors / B. G. Lowe // Nuclear Instruments and methods in Physics Research. – 2000. – V. 439. – P. 247-261
- 111 Papp T., Campbell J.L. Size and origin of the escape peak in various Si(Li) detectors // X-ray spectrometry. — 2001. — V. 30, N2. — P. 77-82.
- 112 Krumrey, M. Calibration of semiconductor photodiodes as soft x-ray detectors/ M. Krumrey, E. Tegeler, G. Ulm // Rev. Sci. Instrum. – 1989. – V. 60, N 7. – P. 2291-2294.
- 113 Lépy, M. Si(Li) Detector Efficiency and Peak Shape Calibration in the Low-Energy Range Using Synchrotron Radiation / M. Lépy [et al.] // X-ray spectrometry. – 1997. – V. 26, № 4. – P. 195-202.

114 Campbell, J. Simulations of Si(Li) x-ray detector response / J. L. Campbell [et al.] // X-ray spectrometry. – 2001. – V. 30, №4 – P. 230-241.

115 Eisberg, R. Design and performance of an 8 cm thick intrinsic germanium detector telescope / R. Eisberg [et al.] // Nuclear instruments and methods. – 1977. – V. 146, №3 – P. 487-495.

116 Гуров, Ю.Б. Измерение толщины нечувствительных слоев полупроводниковых детекторов / Ю. Б. Гуров [и др.] // ПТЭ. – 2008. – № 1. – С. 67-71.

117 Кремний-литиевые детекторы ядерных излучений / С. А. Азимов [и др.]. – Ташкент: ФАН, 1981. – 257 с.

118 Телескопические полупроводниковые детекторы / Ю. Б. Гуров [и др.] // ПТЭ. – 2005. – № 6. – С. 2-12.

119 McCarthy, J. The Effect of Detector Dead Layers on Light Element Detection / J. McCarthy // In X-Ray Spectrometry in Electron Beam Instruments. — 1995. — p 67–81.

120. Алексеев, Н.В. Исследование толщины и однородности чувствительной области кремниевых детекторов / Н. В. Алексеев [и др.] // Вестник МГУ. – 1973. – № 5. – С. 603.

121 Портной, А. Ю. Формирование аналитического сигнала и фона в флуоресцентном рентгенорадиометрическом анализе при использовании радиоактивного источника ^{241}Am и Si(Li) детектора / А. Ю. Портной, Г. В. Павлинский, А. Ю. Духанин // Журнал аналитической химии. – 2004. – Т. 59. – С. 1171-1180.

122 Портной, А. Ю. Об оптимизации соотношения аналитический сигнал / фон в энергодисперсионном рентгенофлуоресцентном анализе / А. Ю. Портной, Г. В. Павлинский, М. С. Горбунов // Журнал аналитической химии. – 2009. – Т. 64. – С. 511-520.

123 Reed, W. A. Gamma Compton profiles of Diamond, Silicon and Germanium / W. A. Reed, P. Eisenberger // Physical review B. – 1973. – V. 16, № 12. – P. 4596- 4604.

124 Felsteiner, J. Effects of electron-momentum distribution on the shape of Compton edge of Si(Li) detector / J. Felsteiner, S. Kagane, B. Rosner // Nuclear instruments and methods. – 1974. – V. 118. – P. 253-255.

125 Papp, T. On response function of solid-state detectors, based on energetic electron transport / T. Papp // X-ray spectrometry. – 2003. – V. 32, №6 – P. 458-469.

126 Scholze, F. Detection efficiency of energy-dispersive detectors with low-energy windows / F. Scholze, M. Procop // X-ray spectrometry. – 2005. – V. 34, №6 – P. 473-476.

127 Salvat, F. Overview of physical interaction models for photon and electron transport used in Monte Carlo codes / F. Salvat, J. Fernández, M. Varea // IOP Metrologia. – 2009. – V. 46, № 2. – P. 112-138. doi:10.1088/0026-1394/46/2/S08

128 Dunn, W. L. Monte Carlo methods for design and analysis of radiation detectors / W. L. Dunn, J. K. Shultis // Radiation Physics and Chemistry. – 2009. – V. 78, № 10. – P. 852-858.

129 An algorithm for Monte Carlo simulation of coupled electron-photon transport / J. Sempaua [et al.] // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms. – 1997. – V. 132, № 3. – P. 377-390.

130 Афонин, В. П. Метод Монте-Карло в рентгеноспектральном микроанализе / В. П. Афонин, В. И. Лебедь. – Н.: Наука. Сиб. Отделение, 1989. – 110 с.

131 Guoa, W. Using the Monte Carlo – Library Least-Squares (MCLLS) approach for the in vivo XRF measurement of lead in bone / W. Guoa, R. P. Gardner, A. C. Todd // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A. – 2004. – V. 516. – P. 586-593.

132 Расчет тормозного спектра электронов отдачи, возникающего при возбуждении рентгеновской флуоресценции излучением радиоактивных источников / А. Ю. Портной [и др.] // Аналитика и контроль. – 2002. – Т. 6, № 4. – С. 390-394.

133 Горбунов, М. С. Длинноволновое тормозное излучение свободных электронов, возникающих в облучаемом материале / М. С. Горбунов, Г. В. Павлинский // Тезисы докладов XVIII Уральской конференции по спектроскопии. – Новоуральск, 2007. – С. 90-91.

134 Pavlinsky, G. V. X-ray Radiation Arising in Free Electron/Substance Interaction / G. V. Pavlinsky, A. Yu. Dukhanin, M. S. Gorbunov // Radiation physics research progress / ed. by Aidan N. Camilleri. – NY, 2008. – P. 301-328.

135 Павлинский, Г. В. Тормозное излучение фото-, Оже и Комптоновских электронов – составляющая фона в длинноволновой области рентгеновской флуоресценции / Г. В. Павлинский, М. С. Горбунов, А. Ю. Портной // Conference on X-Ray Analysis for 30th Anyversary of XRF Analysis in Mongolia: тезисы докладов. – Улан-Батор, 2006. – С. 16.

136 Anderman, G. Scattered X-rays as internal standards in X-ray emission spectroscopy / G. Anderman, J. W. Kemp // Anal. Chem. – 1958. – V. 30. – P. 1306-1309.

137 Ложкин, В. И. Исследование компонента рентгеновского фона, обусловленного флуоресценцией кристалл-анализаторов / В. И. Ложкин, В. П. Афонин // Зав. лаб. – 1976. – Т. 42, № 9. – С. 1073-1074.

138 Sherman, J. The theoretical derivation of X-ray intensities from mixtures / J. Sherman // Spectrochim. Acta. – 1955. – V. 7, № 5. – P. 283-295.

139 Pavlinsky, G. V. Components of background in long wavelength region of X-ray fluorescence spectra / G. V. Pavlinsky, M. S. Gorbunov, L. I. Vladimirova // Proceedings of the 2nd International Conference on X-Ray Analysis. – Ulaanbaatar, 2009. – P. 7-17.

140 Павлинский, Г. В. О формировании фоновой составляющей аналитического сигнала в длинноволновой области рентгеновского спектра флуоресценции / Г. В. Павлинский, М. С. Горбунов, Л. И. Владимирова // Журнал аналитической химии. – 2012. – Т. 67, № 3. – С. 265.

141 Pavlinsky, G. V. Contribution of bremsstrahlung of free electrons to formation of the background component for NaK α X-ray fluorescence / G. V. Pavlinsky, M. S. Gorbunov, L. I. Vladimirova // X-Ray Spectrometry. – 2012. – Т. 41, № 4. – С. 247-252.

142 Об особенностях фона, обусловленных переносом и сбором электронов в Si детекторе / А. Ю. Портной [и др.] // Научное приборостроение. – 2011. – Т. 21, № 4. – С. 145-150.

143 Об оптимизации соотношения сигнал/фон в энергодисперсионном рентгенофлуоресцентном анализе / А. Ю. Портной [и др.] // Журнал аналитической химии. – 2009. – Т. 64, № 5. – С. 511-520.

144 Портной, А. Ю. Метод оценки энергетических и пространственных параметров рентгеновских и гамма детекторов в области энергий до 1 МэВ / А. Ю. Портной, Г. В. Павлинский, М. С. Горбунов // Неразрушающий контроль и диагностика: тезисы докладов. – Томск, 2008. – С. 110.

145 Vincze, L. Monte Carlo simulation of X-ray fluorescence spectra: Part 4. Photon scattering at high X-ray energies / L. Vincze [et al.] // Spectrochimica Acta. Part B. – 1999. – V. 54. – P. 1711-1722.

146 Can, C. An investigation of x-ray escape for an HPGe detector / C. Can, S. Z. Bilgici // X-ray spectrometry. – 2003. – V. 32, № 4. – P. 276-279.

147 Can, C. Escape of photoelectrons and Compton-scattered photons from an HPGe detector / C. Can // X-ray spectrometry. – 2003. – V. 32, № 4. – P. 280-284.

148 Lowe, B. G. Analytical description of low energy X-ray spectra in Si(Li) and HPGe detectors / B. G. Lowe // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. Section A. – 2000. – V. 439, 2-3. – P. 247-261.

149 Портной, А. Ю. Методы оценки энергетических и пространственных параметров рентгеновских и гамма детекторов / А. Ю. Портной // Научное приборостроение. – 2009. – Т. 9, № 4. – С. 13-23.

150 Свойства двухслойных комбинированных детекторов и рентгеновских флуоресцентных энергодисперсионных спектрометров на их основе / А. Ю. Портной, Г. В. Павлинский, М. С. Горбунов, Ю. И. Сидорова // Научное приборостроение. – 2012. – Т. 22, № 1. – С. 25-35.

151 Коляда, В. М. Рентгеноспектральный анализ с ионным возбуждением / В. М. Коляда, А. К. Зайченко, Р. В. Дмитриенко. – М.: Атомиздат, 1978. – 248 с.

152 Portnoy, A. Yu. An estimation of the signal to background ratio limited by photon and electron transport in EDXRF / A. Yu. Portnoy, G. V. Pavlinsky, M. S. Gorbunov // X-ray spectrometry. – 2010. – V. 39, № 1. – P. 41-51.

153 Пат. 2413244 Российская федерация, МПК G 01 T 1/24. Комбинированный полупроводниковый детектор рентгеновского излучения / Портной А. Ю., Павлинский Г. В., Горбунов М. С.; заявитель и патентообладатель ГОУ ВПО Иркутский государственный университет путей сообщения (ИрГУПС (ИрИИТ)). – № 2009118070/28; заявл. 12.05.2009; опубл. 27.02.2011, Бюл. № 6. – 10 с.

154 Оценка свойств рентгеновского флуоресцентного энергодисперсионного спектрометра на основе двухслойного комбинированного детектора / А. Ю. Портной [и др.] // Журнал аналитической химии. – 2012. – Т. 67, № 3. – С. 274.

155 An estimation of EDXRF spectrometer properties, based on a two-layer composite Si-Ge detector / A. Yu. Portnoy [et al.] // X-ray spectrometry. – 2012. — V. 41, № 5. – P. 298-303. DOI: 10.1002/xrs.2396.

156 Горбунов, М. С. Оценка влияния геометрии EDXRF спектрометра на форму спектра при учете многократного рассеяния / М. С. Горбунов, А. Ю. Портной, Г. В. Павлинский // Тезисы докладов VIII Всероссийской конференции по рентгеноспектральному анализу. – Иркутск, 2014.