

УДК 543.52

АНАЛИТИЧЕСКАЯ ЗАВИСИМОСТЬ ЭФФЕКТИВНОГО АТОМНОГО НОМЕРА ОТ ЭЛЕМЕНТНОГО СОСТАВА ВЕЩЕСТВА И ЭНЕРГИИ ИЗЛУЧЕНИЯ В ДИАПАЗОНЕ 40–140 КЭВ

Еретенко А.Н., Цветянский А.Л., Полев А.А.

ФГАОУ ИПО «Южный федеральный университет», Ростов-на-Дону, e-mail: jecker@inbox.ru

Для практических целей необходимо иметь возможность достаточно просто и быстро оценивать эффективный атомный номер используемого сложного по составу вещества, чтобы прогнозировать поведение этого вещества, изменение его характеристик под воздействием облучения фотонами различной энергии. В настоящей работе получено соотношение, описывающее зависимость атомного номера материалов с сильно изменяющимся составом от энергии первичного электромагнитного излучения. Показано, что использование традиционных способов расчета эффективного номера среды в отдельных случаях может приводить к существенным отличиям, что связано с различными методическими подходами в расчетах. Результаты сопоставления расчетов эффективного атомного номера среды с использованием полученного соотношения по экспериментальным данным ряда авторов и теоретическим позволяют говорить о хорошем их согласии. Предложенная аналитическая зависимость эффективного атомного номера от состава вещества и энергии излучения позволяет учесть случаи сильного отличия элементного состава по атомным номерам, существенно упростить его вычисление и будет полезна в технических и научных областях, связанных с взаимодействием рентгеновского и гамма-излучения с веществом.

Ключевые слова: рентгеновское и гамма-излучение, коэффициент ослабления, эффективный атомный номер, двухкомпонентные образцы, сильно отличающиеся атомные номера

ANALYTICAL DEPENDENCE OF THE EFFECTIVE ATOMIC NUMBER OF THE ELEMENT COMPOSITION OF MATTER AND RADIATION ENERGY IN THE RANGE OF 40–140 KEV

Eritenko A.N., Tsvetyanskiy A.L., Polev A.A.

Southern Federal University, Rostov-on-Don, e-mail: jecker@inbox.ru

For practical purposes it is necessary to be able to simply and easily evaluate the effective atomic number to use the complex composition of matter to predict the behavior of the substance, a change in its characteristics under irradiation by photons of different energies. In this paper, a ratio that describes the dependence of nuclear material numbers with strongly varying composition of the primary energy of electromagnetic radiation. It is shown that the use of traditional methods of calculating the effective medium rooms, in some cases, can lead to significant differences, due to different methodological approaches in the calculations. The results of calculations comparing the effective atomic number of the medium with the use of this relation from the experimental data of some authors and theoretical, suggest the good of their agreement. The proposed analytical dependence of the effective atomic number of the composition of matter and radiation energy allows to consider the case of strong differences between the elemental composition of the atomic number, to simplify the calculation and it will be useful in technical and scientific areas related to the interaction of X-ray and gamma-radiation with matter.

Keywords: X-ray and gamma radiation attenuation coefficient, the effective atomic number, of two-component samples, very different atomic numbers

Результаты изучения взаимодействия рентгеновского и гамма-излучения с веществом находят широкое применение во многих областях техники, медицины, радиационной защиты, создании биологических сенсоров. С этой целью необходимо уметь оценивать эффективный атомный номер сложного по составу вещества, чтобы прогнозировать изменение его характеристик под воздействием облучения фотонами различной энергии.

Целью настоящей работы является получение аналитической зависимости эффективного атомного номера от состава вещества и энергии излучения для широкого диапазона изменения энергии излучения и состава мишени.

Теория. Основные формулы

Массовый коэффициент ослабления излучения многоэлементной мишенью можно записать в виде

$$\left(\frac{\mu}{\rho}\right)_c = \frac{N_A}{A_{\text{эф}}} \sigma_{a,c}(Z_{\text{эф}}), \quad (1)$$

где эффективный атомный вес

$$A_{\text{эф}} = \sum_i f_i A_i = \frac{1}{\sum_i \left(\frac{w_i}{A_i}\right)}, \quad (2)$$

а атомный коэффициент ослабления

$$\sigma_{a,c}(Z_{\text{эф}}) = \sum_i f_i \sigma_{a,i} = \frac{A_{\text{эф}}}{N_A} \left(\frac{\mu}{\rho}\right)_c, \quad (3)$$

где $f_i, w_i, A_i, \sigma_{a,i}$ – атомная, весовая концентрация, атомный вес, полный атомный коэффициент ослабления (поперечное сечение) элемента с номером i . N_A – число Авогадро.

В диапазоне энергий $E < 1$ МэВ основными процессами взаимодействия рентгеновского и гамма-излучения с атомами

вещества являются: фотоэлектронное поглощение, когерентное и некогерентное рассеяние, которые зависят от атомного номера элемента как $\sim Z^4$, $\sim Z^2$, $\sim Z$ соответственно [1, 2]. На рис. 1 показана зависимость отношения коэффициента когерентного рассеяния к полному коэффициенту атомного ослабления по данным ХСОМ [4].

Как видно, с увеличением энергии вклад когерентного рассеяния достигает максимального значения и затем уменьшается. Поэтому целесообразно учитывать только фотоэлектрическое поглощение и некогерентное рассеяние и рассматривать энергии излучения больше энергии краёв поглощения атомов элементов, составляющих пробу. Тогда полный атомный коэффициент ослабления излучения в веществе с атомным номером Z можно представить в виде

$$\sigma_a(Z, E) = a(E)Z + b(E)Z^4, \quad (4)$$

полагая, что вклад в ослабление излучения когерентным рассеянием частично или пол-

ностью будет учтен подбором коэффициентов $a(E)$ и $b(E)$ в формуле (4), где E – энергия излучения.

Для нахождения зависимости (4) достаточно оценить два коэффициента a и b . Это можно сделать по двум значениям $\sigma_a(Z, E)$, найденным экспериментально либо взятым, например, из ХСОМ [4]. В данной работе использовался последний способ. На рис. 2 приведены графики зависимости атомных коэффициентов ослабления от атомного номера Z , рассчитанные по формуле (4) с использованием коэффициентов a и b , найденных по двум значениям $\sigma_a(Z, E)$ (в качестве опорных элементов использовались $Z = 13, 50$), взятым из ХСОМ. Расчеты проведены для энергий излучения в диапазоне 40–140 кэВ.

В табл. 1 приведены значения a и b , найденные для различных энергий излучения, и относительная среднеквадратичная ошибка аппроксимации $S_{\text{отн}}$ зависимостью (4) табличных данных полных атомных сечений ХСОМ.

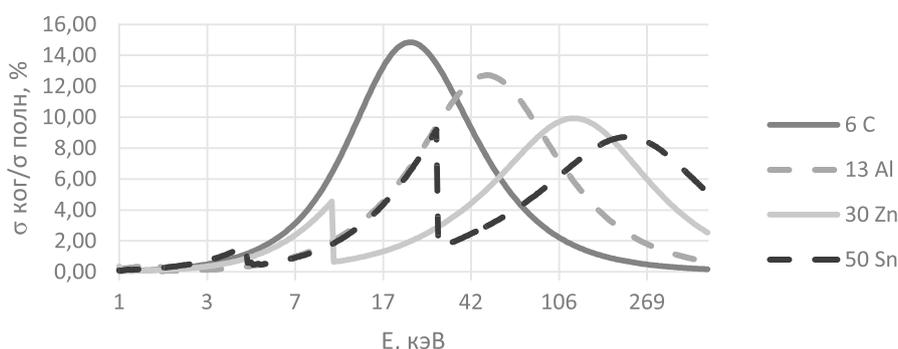


Рис. 1. Зависимость доли когерентного рассеяния в полном атомном сечении ослабления от энергии для элементов с $Z = 6, 13, 30, 50$

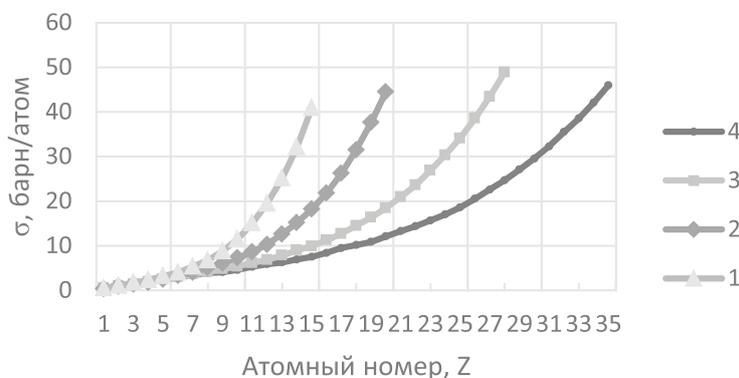


Рис. 2. Зависимость полного атомного коэффициента ослабления от атомного номера Z : 1, 2, 3, 4 соответственно для энергий 40,32; 59,54; 94,52; 136,55 кэВ. Сплошные линии – расчет по формуле (4) с коэффициентами из табл. 1, точки – данные ХСОМ [4]. σ_a в барн/атом

Таблица 1

Значения коэффициентов $a(E)$, $b(E)$, $B(E)$ и точность аппроксимации $S_{\text{отн}}$ для $1 \leq Z \leq 56$

E, кэВ	α	$b \cdot 10^4$	$B \cdot 10^{-4}$	$S_{\text{отн}}, \%$
40,32	0,6199	5,9452	0,10427	8,4
59,54	0,5139	2,0726	0,24793	4,1
94,52	0,4837	0,5745	0,84197	1,6
136,55	0,4509	0,2042	2,20799	1,2

Из результатов табл. 1 и графиков рис. 2 следует вывод о хорошем согласии расчетов по формуле (4) с данными ХСОМ в широком диапазоне энергий и атомных номеров $1 < Z < 56-60$.

Введем обозначения

$$Z_0(Z, E) = \sqrt[4]{\sigma_a(Z, E) / b(E)},$$

$$B(E) = a(E) / b(E),$$

тогда далее, из (4), можно получить

$$Z_0^4 - Z^4 = BZ. \quad (5)$$

Воспользуемся следующей оценкой:

$$(Z_0 - Z)^2 = - \left(2Z_0 - \frac{B}{(Z_0^2 - Z^2)} \right) Z. \quad (6)$$

Величина в скобках правой части должна быть меньше нуля. В этом случае

$$Z_0^2 - \frac{B}{2Z_0} < Z^2 < Z_0^2, \quad (7)$$

т.е. Z – решение уравнения (4) – должно находиться в интервале

$$Z_0 \left(1 - \frac{B}{2Z_0^3} \right)^{1/2} < Z < Z_0, \quad (8)$$

Упростим выражение (8), тогда приближенное аналитическое решение уравнения (4) будет

$$Z \cong Z_0 \left(1 - \frac{B}{4Z_0^3} \right). \quad (9)$$

На рис. 3 и 4 показаны графики зависимости отклонения $(Z_r - Z)$ от Z , где в качестве Z_r использовалось Z_0 (график 1) и $Z_0 \left(1 - \frac{B}{2Z_0^3} \right)^{1/2}$ (график 4).

График под номером 2 соответствует расчету Z_r по формуле (9), а 3 – расчету по формуле $Z_r = \sigma_a / a$. Z – значение атомного номера элемента, которому соответствует величина полного атомного коэффициента

ослабления в формуле (4). В табл. 2 приведены значения абсолютных и относительных среднеквадратических отклонений, максимальное абсолютное отклонение по модулю $\max |Z_{r,i} - Z_i|$ и значение Z_r , при котором наблюдается это отклонение. В табл. 2 указаны также значения $Z_{\text{сшивки}}$, при котором согласовывались $(Z_r - Z)$ для графиков 2 и 3. Из табл. 2 следует, что комбинация двух зависимостей 2 и 3 обеспечивает абсолютное расхождение результатов, не превышающее единицы во всем диапазоне $Z = 1 - 56(60)$ при энергиях 40–140 кэВ.

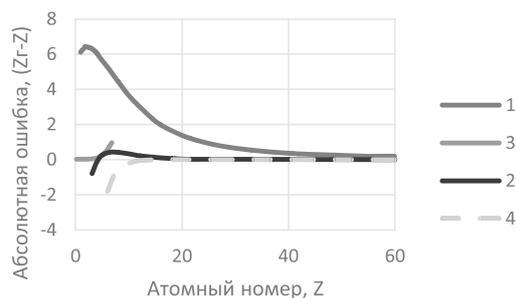


Рис. 3. Ошибка решения уравнения (4) для $E = 59,54$ кэВ, где Z_r : 1 – Z_0 ; 2 – по формуле (9); 3 – $Z = \sigma_a / a$; 4 – по формуле $Z = Z_0 \left(1 - \frac{B}{2Z_0^3} \right)^{1/2}$

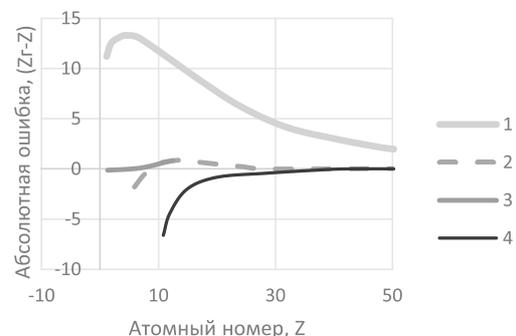


Рис. 4. Ошибка решения уравнения (4) для $E = 136,55$ кэВ, где Z_r : 1 – Z_0 ; 2 – по формуле (9); 3 – $Z = \sigma_a / a$; 4 – по формуле $Z = Z_0 \left(1 - \frac{B}{2Z_0^3} \right)^{1/2}$

Для многоэлементных образцов

$$\sigma_{a,c}(Z_{\text{эф}}) \cong aZ_{\text{эф}} + bZ_{\text{эф}}^4 \quad (10)$$

а полный усредненный атомный коэффициент ослабления определяется по формулам (1–3)

$$\sigma_{a,c} = \sum_i f_i \sigma_{a,i} = \frac{\left(\frac{\mu}{\rho} \right)_c}{N_A \sum_i \left(\frac{w_i}{A_i} \right)} \quad (11)$$

Таблица 2

Характеристики точности вычисления атомного номера Z_r по формуле $Z = \sigma_a / a$ для $Z < Z_{сшивки}$ и по формуле (12) для $Z > Z_{сшивки}$ для энергий в диапазоне 40–140 кэВ

E , кэВ	$S_{абс}$	$\max Z_r - Z $; Z	$S_{отн}$, %	$Z_{сшивки}$	Диапазон Z
40,32	0,09	0,33;5	1,63	3	56
59,54	0,14	0,45;7	1,81	5	1–60
94,52	0,26	0,67;11	2,28	6	1–56
136,55	0,43	0,92;15	2,69	9	1–60

Тогда эффективный атомный номер сложной пробы для данной энергии E можно оценить следующим образом

$$Z_{эф} \cong Z_0 \left(1 - \frac{B}{4Z_0^3} \right), Z_0 = \sqrt[4]{\sigma_{a,c} / b}. \quad (12)$$

В Z_0 (формула(12)) величина $\sigma_{a,c}$ рассчитывается по формуле (11) с использованием табличных значений массового коэффициента ослабления или экспериментальных данных.

Формула (4) для многоэлементной пробы может быть записана в виде

$$\sigma_{a,c} = a \sum_i f_i Z_i + b \sum_i f_i Z_i^4. \quad (13)$$

Тогда величины Z_0 и $Z_{эф}$ приобретают следующий вид

$$Z_0 = \sqrt[4]{B \sum_i f_i Z_i + \sum_i f_i Z_i^4}, \quad (14)$$

$$Z_{эф} \cong Z_0 \left(1 - \frac{B}{4Z_0^3} \right). \quad (15)$$

Учитывая, что величина B зависит от энергии излучения, то формулы (14, 15) описывают зависимость $Z_{эф}$ в явном виде, как от состава пробы, так и от энергии излучения. $B = B(E)$ – единственный параметр, который зависит от энергии используемого излучения. Значения параметра $B(E)$ в рассматриваемом диапазоне энергий приведены в табл. 1. Величины $b(E)$, $B(E)$ можно аппроксимировать зависимостями вида aE^b .

В табл. 3 приведены граничные значения Z_ϵ , при которых с точностью ϵ можно пренебречь фотоэлектрическим поглощением в (4) и вычислять атомный коэффициент ослабления по формуле $\sigma_a(Z_\epsilon) = a(E)Z_\epsilon$. Окончательно, для $Z_{эф}$ можно записать

$$Z_{эф} = \left\{ \begin{array}{l} \frac{\sigma_{ac}}{a(E)}, \sigma_{a,c} \leq a(E)Z_\epsilon \\ Z_0 \left(1 - \frac{B(E)}{4Z_0^3} \right), \sigma_{a,c} \geq a(E)Z_\epsilon \end{array} \right\}. \quad (16)$$

Значение Z_0 (16) можно вычислять по формуле (12) или по формуле (14).

Таблица 3

Значения ϵ , Z_ϵ и $\sigma_a(Z_\epsilon)$ (барн/атом)

кэВ	ϵ , %	Z_ϵ	$\sigma(Z_\epsilon)$	$\sigma_{ХСОМ}(Z_\epsilon)^*$
40,32	1	2,2	1,4	1,29
	5	3,7	2,3	25
59,54	1	2,9	1,5	1,60
	5	5,0	2,6	2,85
94,52	1	4,4	2,1	2,24
	5	7,5	3,6	3,91
136,55	1	6,0	2,7	2,76
	5	10,3	4,7	

Примечание. * – получены линейной интерполяцией табличных значений ХСОМ для $Z = Z_\epsilon$.

Результаты исследования и их обсуждение

В табл. 4, 5 сравниваются значения эффективных атомных номеров, рассчитанных по экспериментальным значениям полных атомных и массовых коэффициентов ослабления [3, 5] и теоретическим ХСОМ [4], используя полученные формулы (12) и (14, 15).

В формуле (12) использовалось полное атомное сечение, а в (14–15) сечение вычислялось по известным составам образцов. Экспериментальные массовые коэффициенты ослабления [3, 5] пересчитывались в атомные по формуле (11). В работе [3] экспериментально были получены массовые коэффициенты ослабления для прессованных образцов окислов CuO , Y_2O_3 , а также BaCO_3 высокой чистоты, их смесей и спеченных образцов, в диапазоне энергий 57–136 кэВ. В табл. 5 приведены полученные результаты для соединений.

Таблица 4

Значения эффективных атомных номеров, полученных по экспериментальным данным работы [5] и рассчитанных по формулам (12, 14, 15) для энергии 59,54 кэВ ($\sigma_{a,c}$ в единицах барн/атом)

Состав, $w_z, \%$	$\sigma_{a,c}^{XCOM}$	$\sigma_{a,c}^{эксп}$	$Z_{эф}^{XCOM} (12)$	$Z_{эф}^{эксп} (12)$	$Z_{эф}^{теор} (14, 15)$
Al-Fe(46,87)	42,9	43,7	19,97	20,1	19,71
Al-Cu(07,55)	17,93	17,8	15,04	15	14,94
Al-Zr(06,88)	24,71	24,8	16,79	16,8	16,65
Al-Mo(09,87)	33	31,1	18,42	14	18,27
Al-Pd(10,08)	39,17	38,6	19,42	19,3	19,33
Al-Cd(09,64)	40,73	38,8	19,66	19,4	19,6
Al-In(23,71)	95,3	96,7	25,13	25,2	25,09
Al-Sn(07,84)	37,42	36,6	19,15	19	19,15
Fe-Cu(08,48)	118,34	127,1	26,67	27,2	26,28
Fe-Zr(07,72)	136,66	136,4	27,73	27,7	27,34
Fe-Mo(11,04)	153,16	156,6	28,6	28,8	28,22
Fe-Pd(11,27)	167,75	170,7	29,3	29,4	28,97
Fe-Cd(10,79)	172,1	172,7	29,51	29,5	29,21
Fe-In (26,05)	276,89	291,1	33,46	33,9	33,26
Fe-Sn (08,80)	166,41	171,1	29,24	29,5	28,97

Примечание. * – экспериментальная ошибка для $\sigma_{a,c}^{эксп}$ в интервале 3–8%.

Таблица 5

Значения эффективных атомных номеров, полученных по экспериментальным данным работы [3] и рассчитанным по формулам (12, 14, 15), для энергий в диапазоне 57–136 кэВ ($\sigma_{a,c}$ в единицах барн/атом)

Состав	Энергия, кэВ	$\sigma_{a,c}^{XCOM}$	$\sigma_{a,c}^{эксп}$	$Z_{эф}^{эксп} (12)$	$Z_{эф}^{XCOM} (12)$	$Z_{эф}^{теор} (14, 15)$
CuO	57,5	96,47	125,5	26,5	24,65	24,2
	77,1	46,25	50,9	24,9	24,2	24
	94,6	29,07	31,7	24,5	23,77	23,8
	136	15,2	15,2	23	23,01	23,28
Y ₂ O ₃	57,5	234,53	241,3	31,6	31,35	30,81
	77,1	107,15	128,9	32,6	30,94	30,6
	94,6	63,69	65,2	30,7	30,52	30,35
	136	27,72	30	30,2	29,36	29,59
BaCO ₃	57,5	437,9	470	37,6	36,9	37,23
	77,1	202,56	198,6	36,6	36,82	36,99
	94,6	119,31	127,8	37,3	36,59	36,68
	136	47,85	42,6	34,1	34,3	35,62

Примечание. ** – ошибка экспериментальных данных оценивается в 8–10% [5].

Можно сделать вывод, что результаты, полученные по формулам (12), (14–15), хорошо согласуются между собой как с использованием экспериментальных, так и теоретических данных для разнообразных многоэлементных образцов в диапазоне

энергий 57–136 кэВ. Сопоставление рассчитанных значений $Z_{эф}$ по предложенным формулам и прямой линейной интерполяцией по данным XCOM [4], используя полные атомные сечения, позволяет сделать вывод о хорошем их согласии.

Выводы

Полученная аналитическая зависимость для $Z_{\text{эф}}$ справедлива в широком диапазоне энергий, элементного состава вещества и обеспечивает согласие $Z_{\text{эф}}$ в пределах экспериментальных погрешностей при различных способах приготовления исследуемых образцов. Аналитическая зависимость эффективного атомного номера не только от состава вещества, но и от энергии позволит существенно упростить его вычисление и будет полезна в областях науки и техники, связанных с взаимодействием рентгеновского и гамма-излучения с веществом.

Список литературы

1. Бахтиаров А.В. Рентгеноспектральный анализ в геологии и геохимии. – Л.: Недра, 1985. – 44 с.
2. Павлинский Г.В. Основы физики рентгеновского излучения. – М.: Физматлит, 2007. – 240 с.
3. Cevic U., Baltas H., Celik S., Karaca I., Kopya A.I. Measurement of mass attenuation coefficients for YBaCuO superconductor at different energies. *Supercond. Sci. Technol.* – 2005. – № 18. – P. 101–106.
4. Berger M.J., Hubbell J.H., 1987/99. XCOM: Photon cross sections database, Web Version 1.2, available at <http://physics.nist.gov/xcom>. National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, MD 20899, USA. Originally published as NBSIR 87-3597 «XCOM. Photon Cross Sections on Personal Computer».
5. Latha P., Vindokumar A.M., Varier K.M., Babu B.R.S., Joseph Antony, Abdullach K.K., Unnikrishnan M.P. Effective atomic numbers for gamma interaction at 59.54 keV in heterogeneous layers of materials using ^{241}Am gamma rays. *Radiations Physics and Chemistr.* – 2012. – № 81. – P. 1817–1822.