

# 圆柱形钨/玻璃复合元件线吸收系数的计算及测量

王雪朋 杨 婧 王丽丽 李玉德 郭 非 赵伟林 付斯特 林晓燕

北京师范大学核科学与技术学院, 射线束技术与材料改性教育部重点实验室, 北京 100875

**摘要** 提出了一种新型的调控高能X射线的光学器件—圆柱形钨/玻璃复合光学元件, 该光学元件是用金属钨在圆柱形玻璃体表面镀膜。用Matlab语言编写程序, 对金属Cu以及钨/玻璃复合光学元件的线吸收系数进行了理论计算。金属Cu线吸收系数的计算结果与常用数据吻合较好, 吸收限位置的线吸收系数的突变证明该程序的高精度。钨/玻璃复合光学元件线吸收系数的计算结果与实验测量数据具有较好的一致性, 同时证明钨/玻璃复合光学元件对低能X射线的滤波作用。

**关键词** X射线光学; 钨/玻璃复合光学元件; 高能X射线; 线吸收系数

中图分类号 TH744

文献标识码 A

doi: 10.3788/AOS201535.1134002

## Measurement of Line Absorption Coefficient of Cylindrical Tungsten/Glass Complex Optical Component

Wang Xuepeng Yang Jing Wang Lili Li Yude Guo Fei Zhao Weilin  
Fu Site Lin Xiaoyan

*Key Laboratory of Beam Technology and Modification, Ministry of Education, College of Nuclear Science and Technology, Beijing Normal University, Beijing 100875, China*

**Abstract** A cylindrical tungsten/glass complex optical component is proposed for the transmission of high energy X-ray. The cylindrical tungsten/glass complex optical component uses tungsten film to reflect and focus high energy X-ray. Using a Matlab program, the line absorption coefficients of metal Cu and the tungsten/glass complex optical component are calculated. Theoretical calculation results of metal Cu agree with common databases and the saltation of the line absorption coefficient at the absorption edge proves the high-precision of this program. Calculation results of the optical component are consistent with experimental results, which prove the optics can filter low-energy X-ray.

**Key words** X-ray optics; tungsten/glass complex optical component; high energy X-ray; line absorption coefficient

**OCIS codes** 340.7480; 300.1030; 260.6970

## 1 引言

近些年,随着X射线应用范围的拓展,基于全反射原理的玻璃毛细管光学元件在现代科技领域发挥了越来越重要的作用,它实现了宽波段X光束的调控,为有效使用X光源、提高X光仪器设备性能开辟了途径,广泛应用于X光光刻, X光衍射分析和X光荧光分析等领域<sup>[1-5]</sup>。目前的玻璃毛细管由于受到材料全反射临界角的限制,能够有效调控X射线的能量上限为30 keV左右<sup>[6]</sup>,而像医学、工业探伤及安检等领域使用的X射线能量都高于40 keV,随着高能X射线越来越广泛的应用,对高能X射线的有效调控也成为迫切需要。

X射线在真空或空气中传输时,全反射掠入射临界角 $\theta_c$ 和X射线能量 $E$ 、反射材料密度 $\rho$ 的关系

收稿日期: 2015-05-05; 收到修改稿日期: 2015-05-27

基金项目: 北京高等学校青年英才计划项目(YETP0255),北京市自然科学基金(1132015),国家重大科学仪器设备开发专项(2013YQ24051104)

作者简介: 王雪朋(1988—),女,硕士研究生,主要从事X射线光学方面研究。E-mail: 201321220020@mail.bnu.edu.cn

导师简介: 林晓燕(1980—),女,副教授,硕士生导师,主要从事X射线光学方面研究。

E-mail: linxiaoyan@bnu.edu.cn(通信联系人)

$\theta_c = k\sqrt{\rho}/E$  ( $k$ 为常数),可见,对于能量一定的X射线,在密度较大的金属材料表面的全反射掠入射临界角要大于在玻璃材料表面的全反射掠入射临界角<sup>[7-8]</sup>。因此,以金属材料作为反射面可以起到调控较高能量的X射线的作用。目前,国外一些研究者制备出了金属毛细管,与玻璃毛细管相比,X射线的全反射临界角增大,但反射面的表面粗糙度也明显增加,这严重影响到毛细管的传输效率<sup>[9-10]</sup>。

本文提出的圆柱形钨/玻璃复合光学元件是在圆柱形实心玻璃体的表面镀上一层钨膜,可以综合玻璃表面粗糙度小和金属材料全反射临界角大的优势,实现对高能X射线的传输。与圆锥形金属/玻璃复合元件相比,圆柱形金属/玻璃复合元件更容易制作出接近理想状态的形状,且会聚区域可以远离元件出口,元件和样品之间可以有足够的空间,给实际应用带来很大方便<sup>[11]</sup>。由于该元件内部为实心玻璃,而玻璃对X射线的吸收要远大于空气对X射线的吸收,因此在使用时需要对该元件的线吸收系数进行测量。本文用Matlab语言编写了程序,对钨/玻璃复合元件的线吸收系数进行了理论计算,并与实验测量的结果进行了对比。

## 2 理论计算

单色X射线穿透介质后的强度衰减与射线在介质中经过的距离成正比,所以单色X射线束穿过介质后的衰减规律  $I = I_0 \exp(-\mu Z)$ ,其中  $Z$  表示穿过物质的厚度, $\mu$ 为介质的线吸收系数,描述的是介质的吸收特性。

### 2.1 基本公式

X射线在均匀介质中的折射率可表示为:

$$n = \sqrt{1 - \alpha - i\gamma} = 1 - \delta - i\beta \approx 1 - \frac{\alpha}{2} - i\frac{\gamma}{2}, \quad (1)$$

式中 $\alpha$ 、 $\gamma$ 、 $\delta$ 、 $\beta$ 均为实数, $\alpha$ 和 $\delta$ 描述介质的极化特性, $\gamma$ 和 $\beta$ 描述介质的吸收特性,且:

$$\alpha = 0.54 \times 10^{-5} \frac{\rho}{\sum K_j A_j} \lambda^2 \sum K_j f_{1j}, \quad (2)$$

$$\gamma = 0.54 \times 10^{-5} \frac{\rho}{\sum K_j A_j} \lambda^2 \sum K_j f_{2j}, \quad (3)$$

式中 $\rho$ 是均匀介质的密度, $\lambda$ 是入射X射线的波长, $A_j$ 是均匀介质中的第 $j$ 种元素的原子量, $K_j$ 是该元素在均匀介质中的含量, $f_{1j}$ 与元素有关,在远离共振的区域近似等于元素的原子序数, $f_{2j}$ 是第 $j$ 种元素的原子吸收因子,与元素和能量有关。每种元素的 $f_1$ 和 $f_2$ 都可通过网上数据库查得。

由  $\gamma = \frac{\mu_1 \lambda}{2\pi}$  推得介质的线吸收系数的计算公式为:

$$\mu_1 = \frac{2\pi\gamma}{\lambda}. \quad (4)$$

### 2.2 参数计算

由(1)~(4)式可知,计算介质的线吸收系数 $\mu_1$ 关键要计算出其吸收特性参数 $\gamma$ ,计算 $\gamma$ 所需要的数据有两类:一类关于介质材料的数据,包括材料的密度 $\rho$ 和组成成分及各成分的含量;二类关于各元素的数据,包括组成介质材料的各种元素的原子量 $A_j$ 、原子吸收因子 $f_{2j}$ 以及元素在玻璃材料中的含量 $K_j$ 。其中,组成材料中各元素的原子量 $A_j$ 、材料的密度 $\rho$ 、组成成分及各成分的含量都可以直接得到,而各组成元素在材料中的含量 $K_j$ 和原子吸收因子 $f_{2j}$ 则需要通过计算求得。

#### 2.2.1 $K_j$ 的计算

以计算型号为BJ40的玻璃材料的线吸收系数为例。BJ40玻璃材料的密度  $\rho = 2.29 \text{ g/cm}^3$ ,它由6种组分构成,各组成成分及其含量如表1所示。

由表1可以看出,玻璃厂家提供的只是各元素的氧化物在玻璃材料中的含量,而不是直接提供各元素的含量,因此,玻璃材料中每一种元素的含量都需要进行计算。玻璃材料中第 $j$ 种元素的含量的计算公式为:

$$K_j = \sum_{i=1}^m \frac{h(i)n_j(i)A_j}{b(i)}, \quad (5)$$

式中  $m$  是玻璃材料中所含的氧化物组分的种类数,对于 BJ40 玻璃材料,  $m = 6$ ;  $h(i)$  是材料中第  $i$  种氧化物组分的质量百分含量;  $b(i)$  是第  $i$  种氧化物组分的分子量;  $n_j(i)$  是第  $j$  种元素在第  $i$  种氧化物组分中的原子个数(即一个第  $i$  种氧化物组分分子中所含的第  $j$  种元素的原子个数),  $A_j$  是第  $j$  种元素的原子量。通过(5)式便可以分别计算出 O、Si、B、Al 等七种元素在 BJ40 玻璃材料中的含量  $K_j$ 。

表 1 BJ40 玻璃的各组成成分及其含量

Table 1 Components and contents of BJ40

Components	Contents /%
SiO <sub>2</sub>	75.7
B <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	15
Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	3
CaO	0.5
Na <sub>2</sub> O	2.9
K <sub>2</sub> O	2.9

### 2.2.2 $f_{2j}$ 的计算

通过网上数据库可查<sup>[12]</sup>得每种元素在一定能量范围内的原子吸收因子  $f_2$  的值,但各能量点之间是不连续的,以 Si 元素为例,在能量范围为 30~50 keV 时,通过网上数据库查得的各能量对应的 Si 元素的原子吸收因子  $f_2$  的值如表 2 所示。

表 2 不同能量对应的 Si 元素的  $f_2$  值

Table 2  $f_2$  values of silicon element of different energy

Energy	$f_2$
$3.001405 \times 10^1$	$2.2797 \times 10^{-2}$
$3.208502 \times 10^1$	$1.9779 \times 10^{-2}$
$3.429889 \times 10^1$	$1.7161 \times 10^{-2}$
$3.666551 \times 10^1$	$1.4890 \times 10^{-2}$
$3.919543 \times 10^1$	$1.2919 \times 10^{-2}$
$4.189992 \times 10^1$	$1.1160 \times 10^{-2}$
$4.479101 \times 10^1$	$9.6400 \times 10^{-2}$
$4.788159 \times 10^1$	$8.3272 \times 10^{-2}$

由表 2 可以看出,在 30~50 keV 能量范围内, Si 元素能够在网上数据库中查到的只有表中所列出的 8 个能量点所对应的原子吸收因子  $f_2$  的值,缺少很多能量对应的  $f_2$  值。因此,为了得到所有能量对应的原子吸收因子  $f_2$ ,通过插值法进行计算。对于任一能量  $E$ ,且  $E(i) < E < E(i+1)$ ,如图 1 所示。

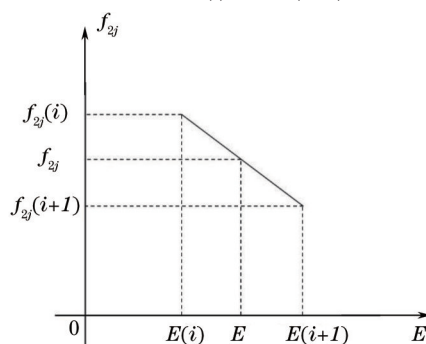


图 1 插值法计算任一能量对应的  $f_{2j}$

Fig.1 Calculation of  $f_{2j}$  of each energy by interpolation method

则能量  $E$  所对应的材料中第  $j$  种元素的原子吸收因子  $f_{2j}$  为:

$$f_{2j} = f_{2j}(i+1) + \frac{E(i+1) - E}{E(i+1) - E(i)} [f_{2j}(i) - f_{2j}(i+1)], \quad (6)$$

式中  $E(i)$  和  $E(i+1)$  分别表示数据库中能够查到的且与能量  $E$  最接近的两个能量点。

用上述方法便可以求出介质材料中所有元素在各种能量下对应的原子吸收因子 $f_3$ 的值。

### 2.3 理论计算结果

针对上述算法用 Matlab 编程,所编写程序可以计算能量范围 1~433 keV,各种金属材料 and 玻璃材料的线吸收系数。

图 2 是利用计算程序对金属元素 Cu 在 3~40 keV 能量范围内线吸收系数的计算结果,并将所得计算结果与查表<sup>[12]</sup>得到的 Cu 元素在不同能量下的线吸收系数进行了对比。

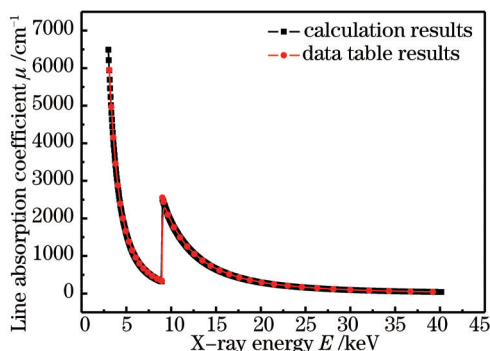


图 2 计算和查表所得金属元素 Cu 线吸收系数

Fig.2 Calculation results and data table results of line absorption coefficient of metal element Cu

可以看出,计算和查表所得金属元素 Cu 线吸收系数有非常好的吻合。在能量为 8.98 keV 时,线吸收系数突然增大,这种不连续性是因为在 X 射线的能量达到 8.98 keV 时,达到了激发 Cu 元素 K 能级的临界激发能量,吸收急剧增大,这一临界值称为 K 吸收限,元素的线吸收系数曲线会在吸收限的位置发生突变。

图 3 是利用程序对三种已经使用过的玻璃材料在 10~50keV 能量范围内线吸收系数的计算结果。三种玻璃材料分别为中国北京玻璃材料(型号分别为 BJ40 与 BJ30)和德国玻璃材料(型号 SCHOTT),玻璃材料组分如表 3 所示。

表 3 三种玻璃材料的组分

Table 3 Components of three glass materials

Model	Components and contents
BJ40	SiO <sub>2</sub> 75.7%, B <sub>2</sub> O <sub>3</sub> 15%, Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> 3.0%, CaO0.5%, Na <sub>2</sub> O2.9%, K <sub>2</sub> O2.9%
BJ03	SiO <sub>2</sub> 70.0%, B <sub>2</sub> O <sub>3</sub> 6.0%, Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> 6.2%, CaO 3.0%, BaO 2.1%, Na <sub>2</sub> O 5.9%, K <sub>2</sub> O 5.9%
SCHOTT	SiO <sub>2</sub> 69.0%, B <sub>2</sub> O <sub>3</sub> 1.0%, Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> 4.0%, CaO 5.0%, BaO 2.0%, Na <sub>2</sub> O 13.0%, K <sub>2</sub> O 3.0%, MgO 3%

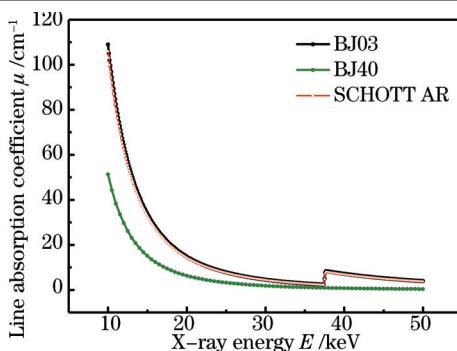


图 3 三种玻璃材料的线吸收系数计算结果

Fig.3 Calculation results of line absorption coefficient of three glass materials

从图 3 可以看出,型号为 BJ03 和 SCHOTT 的玻璃材料线吸收系数非常接近,主要由它们的玻璃组分所决定。从表 3 看出,型号为 BJ03 和 SCHOTT 的玻璃组分相对来讲比较接近,而且明显不同于 BJ40 的玻璃组分。在图 3 中也可明显看出,在低能端玻璃材料 BJ40 的线吸收系数明显低于 BJ03 和 SCHOTT 的线吸收系数,在 10keV 能量点处 BJ03 和 SCHOTT 的线吸收系数达到 BJ40 的 2 倍。随着 X 射线能量的增大,线吸收系数慢慢趋于接近,但 BJ40 的依然偏低。在能量为 37.5keV 时,BJ03 和 SCHOTT 线吸收系数突然增大,是由于玻璃材料 BJ03 和 SCHOTT 中存在少量 BaO,这种突变是 Ba 的吸收限作用的结果。

### 3 实验及结果讨论

由于对低能的过滤作用是钨/玻璃复合元件的一个突出特点,选择对低能端有着高吸收系数、并且表面光滑的德国玻璃材料(型号 SCHOTT)制作复合元件并通过实验测量其对不同能量的吸收过滤作用。

#### 3.1 实验条件

图4是测量钨/玻璃复合元件线吸收系数的实验装置示意图,由光源、准直系统、钨/玻璃复合元件和探测器等组成,图中所画光线为光源经准直系统限束后到达玻璃体的边缘光线。其中光源为 OXFORD 高亮微聚焦光源,钨靶,15 μm 焦斑,探测器是德国的 RONTEC Xflash Detector 2001。

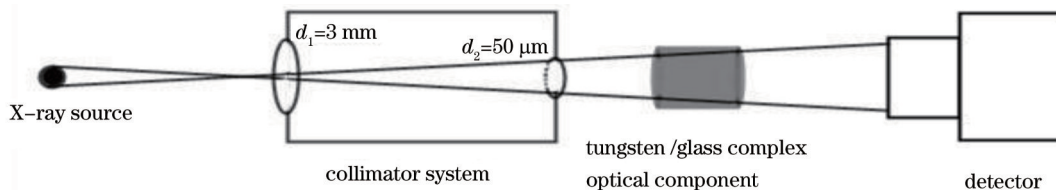


图4 实验装置示意图

Fig.4 Sketch of experimental device

实验中 X 射线光源所加电压为 70 kV,功率为 20 W;准直系统长度  $L_0 = 220$  mm,用于形成发散度很小的 X 光束;圆柱形钨/玻璃复合元件长度  $L = 14$  mm,直径  $d = 2$  mm。准直系统的入口和出口处都放有圆形光阑,入口光阑直径  $d_1 = 3$  mm,以保证从光源发出的 X 光尽可能多的进入准直系统;出口光阑直径  $d_2 = 50$  μm,可以保证从准直系统出射的 X 光束有较小的发散度。准直系统出口到钨/玻璃复合元件入口的距离  $D = 35$  mm,能够保证从准直系统出射的 X 射线束能够全部进入钨/玻璃复合元件,且能够保证未被玻璃吸收的 X 射线能够全部从钨/玻璃复合元件出口射出。实验记录有无钨/玻璃复合元件时进入探测器的 X 射线的两个能谱。两次测量的时间均为 300 s。

#### 3.2 结果与分析

用 Matlab 软件对实验测得的谱图进行分析,将谱图分成几个不同的能量区间,并计算出不同能量区间内的光强计数,有无钨/玻璃复合元件的光强计数分别用  $I$  和  $I_0$  表示,根据 X 射线束在物质中的衰减规律  $I = I_0 \exp(-\mu z)$ ,线吸收系数  $\mu$  的计算公式为:

$$\mu_2 = \frac{-\ln(I/I_0)}{L} \quad (7)$$

$L$  为钨/玻璃复合元件的长度。就能得到不同能量区间的钨/玻璃复合元件的线吸收系数  $\mu$ 。

表4 不同能量段线吸收系数的实验结果

Table 4 Experimental results of line absorption coefficient of different energy

$E$ /keV	Experimental line absorption coefficient $\mu$ /cm <sup>-1</sup>
25-30	1.7209
30-35	1.4652
35-40	1.0955
40-45	0.8360
45-50	0.7576

可以看出,随着能量的增加,线吸收系数逐渐减少。图5是实验测量结果与理论计算结果的对比。可以看出,实验结果与理论计算结果较接近,且有相同的变化规律:随入射 X 射线能量的增加,钨/玻璃复合元件对 X 射线的线吸收系数逐渐减小。同时由于 SCHOTT 中含有 2.0% BaO,理论计算的高精度在能量为 37.5 keV 时,表现出了 Ba 的吸收限突变作用。但由于实验测量的精度无法达到理论计算精度,所以实验结果没有表现出吸收系数的突变现象。

同时实验用光源为钨靶,最大功率 45 W,加高压后产生连续光谱,在 X 射线穿过钨/玻璃复合元件的过程中,由于玻璃对 X 射线的上述吸收特性,不但 X 射线的总强度会减小,而且平均波长也会向短波的方向移动,也就是说高能光子所占的比例增大,这说明钨/玻璃复合光学元件有很好的滤波作用。对于低于 25 keV



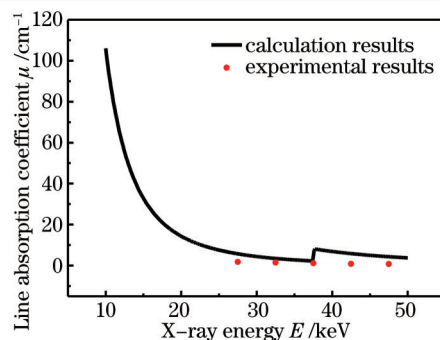


图5 实验测量与理论计算线吸收系数对比图

Fig.5 Comparison of line absorption coefficient of calculation results and experimental results

的 X 光子,在实验过程中完全被玻璃吸收,所以无法通过实验测量其线吸收系数。利用玻璃对 X 射线的这种吸收特性,既可以抑制低能 X 射线,同时又能使高能 X 射线保持较高的传输效率。

## 4 结 论

利用 Matlab 语言编写的程序,可以计算任意一种元素以及各种组分的化合物对任一能量的线吸收系数。以金属 Cu 为例,其线吸收系数的计算结果与常用数据符合很好,吸收限位置线吸收系数的突变也证明了该程序的高精度。同时分别对钨/玻璃复合光学元件的线吸收系数进行了理论计算和实验测量。钨/玻璃复合元件的线吸收系数随入射 X 射线能量的增加而减小。通过复合元件的 X 射线束,高能 X 射线所占的比例增加,证明了钨/玻璃复合光学元件有很好的滤波作用。连续 X 射线在通过钨/玻璃复合元件的过程中,随着通过长度的增加,平均波长会向短的方向移动。

## 参 考 文 献

- 1 Chen Xiangcun, Li Ruipeng, Liu Ke, *et al.*. Study on single-bounced capillary focus based on NSRLX-ray diffraction and scattering station[J]. Nuclear Electronics & Detection Technology, 2010, 30(9): 1150-1155.  
陈香存,李锐鹏,刘科,等.基于 NSRL 衍射和散射站的单次反射毛细管聚焦研究[J].核电子学与探测技术,2010,30(9): 1150-1155.
- 2 K Ricketts, C Guazzoni, A Castodi, *et al.*. An X-ray fluorescence imaging system for gold nanoparticle detection[J]. Physics in Medicine and Biology, 2013, 58(21): 7841-7855.
- 3 M Dehlinger, C Fauquet, F Jandaed, *et al.*. Toward sub-micro-XRF working at nanometer range using capillary optics[J]. X-Ray Spectrometry, 2013, 42(6): 456-461.
- 4 B Ravel, K Attenkofer, J Bohon, *et al.*. Diamond sensors and polycapillary lenses for X-ray absorption spectroscopy[J]. Review of Scientific Instruments, 2013, 84(10): 103106.
- 5 Xingchen Pan, S P Veetil, Cheng Liu, *et al.*. High-contrast imaging for weakly diffracting specimens in coherent diffracting imaging [J]. Chin Opt Lett, 2013, 11(2): 021103.
- 6 A Bjeoumikhova, M Erko, S Bjeoumikhova, *et al.*. Capillary  $\mu$ Focus X-ray lenses with parabolic and elliptic profile[J]. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A, 2008, 587(2): 458-463.
- 7 Sun Tianxi, Liu Zhiguo, Peng Song, *et al.*. Study on resolution limit of total-reflection X-ray optics with Heisenberg uncertainty principle[J]. Chinese J Lasers, 2013, 40(12): 1217001.  
孙天希,刘志国,彭松,等.利用海森堡不确定性原理研究完全反射 X 射线光学器件的焦斑极限[J].中国激光,2013,40(12): 1217001.
- 8 Zhi Chen, Hongan Xie, Biao Geng, *et al.*. Toward one nanometer X-ray focusing: a complex refractive lens design[J]. Chin Opt Lett, 2014, 12(12): 123401.
- 9 R Mroczka, G Zukocinski, A Kuczumow. Investigations of X-ray metallic capillaries[J]. Journal of Alloys and Compounds, 2005, 401(1): 108-117.
- 10 R Mrouka, P Bartosik, Z Sawlowicz, *et al.*. Optimization of metallic X-ray capillary production[J]. Thin Solid Films, 2008, 516(22):

8029-8035.

11 Li Yude, Lin Xiaoyan, Wang Dachun. Study on the convergent function of a cylinder capillary transmitting X-ray[J]. High Energy Physics and Nuclear Physics, 2006, 30(9): 916-919.

李玉德, 林晓燕, 王大椿. 会聚 X 射线圆柱形直导管特性研究[J]. 高能物理与核物理, 2006, 30(9): 916-919.

12 National Institute of Standards and Technology. NIST Atomic Spectra Database Lines Form[OL]. [http://physics.nist.gov/PhysRefData/ASD/lines\\_form.html](http://physics.nist.gov/PhysRefData/ASD/lines_form.html)[2015-07-01].

栏目编辑: 刘丰瑞