

# 偏振 X 射线荧光系统测量痕量 Cd 元素的 Geant4 模拟研究

欧阳周璇, 马英杰, 李豆豆, 刘 易

成都理工大学, 四川 成都 610059

**摘 要** 通过传统能量色散 X 射线荧光分析(EDXRF)对 Cd 元素进行痕量分析时, X 光管发出的原级韧致辐射连续谱对 Cd 元素的分析具有严重的影响。为了减弱原级 X 射线对测量结果的影响, 通过 Geant4 程序包模拟不同几何尺寸下偏振激发 X 射线荧光分析(P-EDXRF)中荧光靶的结构, 研究其在减弱测量过程中原级 X 射线韧致辐射连续谱的影响。为了提高模拟效率, 本文分三步进行模拟。第一步模拟不同管电压下电子打靶过程, 得到不同管压下的 X 光管原级能谱。第二步针对 Cd 元素的痕量分析设置不同种类、不同几何条件的 Te 及 BaSO<sub>4</sub> 作为荧光靶材料进行模拟。结果表明在使用 K<sub>α1</sub> 能量(27.468 keV)与 Cd 元素吸收限 26.711 keV 最为接近的 Te 作为荧光靶材料时, 随着 Te 靶厚度增加 Te 元素的特征峰强度在 100 μm 前快速增长, 在 150 μm 后趋于稳定。而其信噪比(SNR)在 80 μm 到达最大值 21.434。继续增加厚度由于荧光靶材料的自吸收作用 SNR 开始有些许下降, 达到饱和吸收厚度后稳定。在不同应用场景时荧光靶选材应有不同, 对于测量时间没有限制的条件下, 应选择荧光强度更大的荧光靶厚度。而对于测量时间相对较短的条件下, 则应该选择 SNR 更大的荧光靶厚度。第三步模拟通过荧光靶后的出射能谱激发含 0.01% Cd 的样品, 经过 Te 靶后的出射能谱激发样品, 得到 Cd 元素 K<sub>α1</sub> 峰背比为 8.28。相较于直接通过原级谱激发样品, Cd 元素 K<sub>α1</sub> 峰背比为 2.29, 其峰背比明显提高但 Te 元素的散射峰对 Cd 元素 K<sub>α1</sub> 峰仍然有所影响。选用特征 X 射线能量与 Cd 元素 K<sub>α1</sub> 相距更远的 BaSO<sub>4</sub> 作为荧光靶材料, 可减弱由于样品中的基体轻元素的散射作用而引起目标元素的峰背比降低情况, 可将 Cd 元素 K<sub>α1</sub> 峰背比提高至 14.179。通过增大 X 光管管电压可进一步提高激发效果, 在管电压为 70 kV 时对于 Cd 元素有最佳激发效果, 峰背比为 21.431。

**关键词** Geant4; 荧光靶; 痕量分析; P-EDXRF

**中图分类号:** O433.4 **文献标识码:** A **DOI:** 10.3964/j.issn.1000-0593(2022)04-1064-06

## 引 言

在传统能量色散 X 射线荧光分析(energy dispersive X-ray fluorescence analysis, EDXRF)中, 通常由 X 光管出射的原级 X 射线作为激发源进行样品激发。这样的激发方式虽然能有效的激发样品, 同样也给输出能谱带来极大的散射背景。在许多痕量分析过程中, 待分析元素含量通常较低, 激发出的特征 X 射线在能谱中会被散射背景所掩盖。为了降低散射背景提高峰背比, 通常需要将原级 X 射线单色化或进行选择性激发, 常用的方法有选用滤光片<sup>[1]</sup>或二次靶<sup>[2]</sup>。

自 1906 年 Barkla 发现偏振现象以来, 目前偏振 X 射线荧光分析(polarized energy dispersive X-ray fluorescence analysis, P-EDXRF)系统由二次靶的不同分为三类: 巴克拉靶、布拉格靶、以及荧光靶。前两类靶原理是通过将 X 射线电磁

横波经转换靶偏振为垂直于传播方向的偏振光后激发样品。在地质样品、矿山样品、古陶瓷等样品<sup>[3-7]</sup>分析中可在短时间测量内达到更低的检出限且结果精确。而荧光靶则是通过原级 X 射线照射特定材料的荧光靶, 再通过荧光靶材激发出的特征 X 射线去激发样品, 保留了 X 线管作激发源的优点, 又实现了 X 射线的单色化, 极大程度上降低了能谱的散射背景同时又能选择性的激发特定元素。如 Cd 等重金属元素在土壤中过量沉积, 会污染土壤、改变土质, 通过粮食等农作物由食物链进入人体, 进而威胁人体健康<sup>[8-9]</sup>。所以对于土壤和粮食<sup>[10]</sup>等农产品中的重金属元素检测具有重要意义。而其含量通常在 10<sup>-6</sup> 量级, 传统 EDXRF 难以有效激发样品中的 Cd 元素<sup>[11]</sup>张丽娇等<sup>[12]</sup>通过 MCNP5 软件模拟不同材质滤光片对比 Cd 元素激发效果发现, 选用 Fe 作为滤光片具有最优峰背比和激发效果。

Geant4 作为蒙特卡罗程序包的一种, 经过多年的改进与

收稿日期: 2021-03-13, 修订日期: 2021-05-31

基金项目: 四川省重大科技专项(19ZDZD0137), 国家自然科学基金项目(12075038)资助

作者简介: 欧阳周璇, 1997 年生, 成都理工大学硕士研究生 e-mail: 962400101@qq.com

发展不断精确物理过程模型，使其在荧光模拟中有较高的精度<sup>[13]</sup>。Johnston 等<sup>[14]</sup>通过 Geant4 软件模拟不同荧光靶的出射光谱，计算出不同条件下荧光靶的最佳厚度。本文通过 Geant4 程序包提出三步模拟偏振 X 射线荧光探测系统，既提高模拟效率、模拟精确度，还能获得中间状态光谱研究中中间变量变化情况。通过模拟偏振 X 射线荧光系统测量痕量 Cd 元素的过程，研究不同条件下的荧光靶出射光谱，寻求荧光靶的最佳材料选择和几何布置以达到最佳激发效果。

## 1 实验部分

### 1.1 探测系统模型构建

三维偏振 X 射线荧光分析系统的基本结构由 X 光管、准直器、荧光靶、样品、探测器等部分组成，其基本结构如图 1 所示。

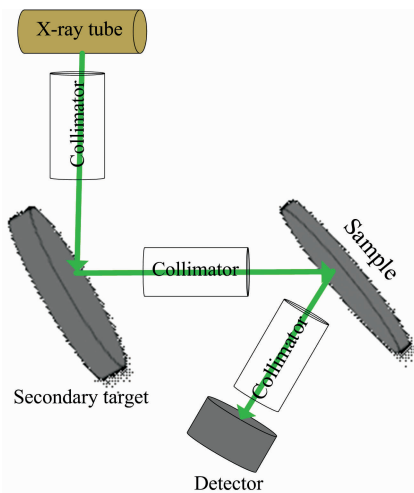


图 1 偏振 X 射线荧光分析系统基本结构图

Fig. 1 Schematic geometry for polarized beam XRF

X 光管、荧光靶、样品以及两光路间的准直器构成第一个垂直光路平面。荧光靶、样品与探测器及光路间准直器构成第二个水平光路平面，两个光路平面相互正交。整个三维偏振荧光系统光路由 X 光管中电子打靶产生的原级 X 射线在垂直光路平面中经过准直器准直后射向荧光靶，经荧光靶转换激发其特征 X 射线后在水平光路中经准直器准直后射向样品，激发待分析样品后经准直器被 SDD 探测器探测。

### 1.2 模拟方法设计

由 X 光管产生的荧光是由电子枪发出的电子在电场力的作用下轰击阳极靶产生，这一过程产生荧光的效率低，需要大量的电子打靶才能产生足够的荧光完成后续荧光激发样品特征 X 射线的过程。而由荧光激发特征 X 射线这一过程效率也并不高，同样需要大量的荧光。整个荧光探测系统若通过一次模拟，会使模拟效率很低，难以达到模拟目标。为了提高 Geant4 模拟效率，结合偏振荧光系统的特征，本文提出将整个探测系统的模拟分为三步完成。

第一步：通过 Geant4 程序包模拟电子打靶过程，模拟中物理过程模型选用 G4EMPEnvelope 模型，Penelope 模型在模

拟低能电子中具有较高的精确度。阳极靶材选用 W，Be 窗厚度为 200  $\mu\text{m}$  的侧窗型 X 光管。通过改变阳极靶角  $0^\circ \sim 50^\circ$ 、电场电压 50~70 kV，得到不同条件下的 X 射线原级能谱。

第二步：以第一步模拟得到的 X 射线原级能谱为激发源，模拟偏振 X 射线荧光探测系统中荧光靶的出射能谱，物理过程模型选用 G4EMLivemore 模型，该模型对低能光子瑞利散射等低能过程精确度较高。为了更好地激发出样品中的痕量 Cd 元素，本次模拟选用金属 Te 和  $\text{BaSO}_4$  作为荧光靶材料。Te 元素的  $K_{\alpha 1}$  射线能量为 27.468 keV 与 Cd 的吸收限 26.711 keV 接近能够高效的激发出 Cd 的特征 X 射线。而 Ba 元素的  $K_{\alpha 1}$  射线能量为 32.188 keV 在能谱上与 Cd 的  $K_{\alpha 1}$  射线 23.172 keV 有着相对较远的距离，不容易相互堆积干扰。

第三步：将荧光靶出射光谱作为输入源，完成样品激发模拟过程，而后通过 SDD 探测器进行测量，从而完成整个偏振 X 射线荧光测量系统的模拟。相较于单次模拟整个测量系统、或两步模拟测量系统来说，通过三步模拟用时更短，结果准确度更高，统计涨落更低。

## 2 结果与讨论

为了验证 Geant4 程序在模拟荧光过程中的正确性，将在 50 kV 电压下激发 W 靶的模拟能谱与实验能谱作比较，结果如图 2 所示。

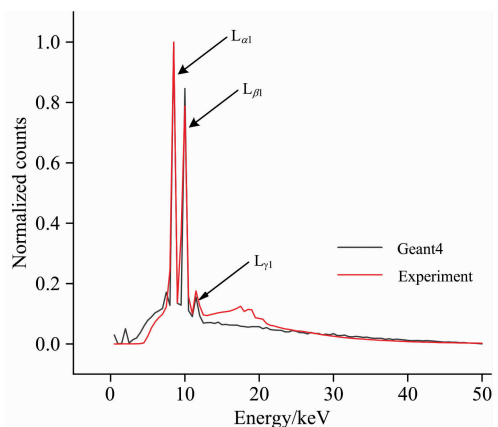


图 2 50 kV 管电压下实验能谱与 Geant4 模拟能谱比较

Fig. 2 Comparison of experimental primary spectrum and GEANT4 with 50kV tube voltage

可以看出 W 元素 8.396 keV 的  $L_{\alpha 1}$ 、9.671 keV 的  $L_{\beta 1}$  以及 11.284 keV 的  $L_{\gamma 1}$  三个特征 X 射线峰都严格对齐、韧致辐射连续谱基本一致。在 15~20 keV 的突起鼓包为在测量过程中原级 X 射线激发了准直材料引起的。这也正是在传统 EDXRF 中不愿意看到的情况，在韧致辐射连续谱上出现两个小鼓包，这会导致我们对能谱分析的困难。

### 2.1 阳极靶角与荧光强度

在不同角度的阳极靶角 ( $0^\circ \sim 50^\circ$ ) 下侧窗型 X 光管能谱模拟结果如图 3、图 4 所示。定义荧光探测率

$$\eta = N_d / N_e \quad (1)$$

式(1)中， $N_d$  为进入探测器的荧光光子数， $N_e$  为电子枪发

射的电子数。由图可见,随着阳极靶角的增大荧光强度及荧光探测率不断增大,且在阳极靶角为  $45^\circ$  时荧光探测率取得最大值。而随着阳极靶角增大,随之而来的问题是焦斑也随之变大,综合考虑选取阳极靶角  $20^\circ$  左右,能在保证具有较高荧光收集效率的同时具有较小的焦斑。

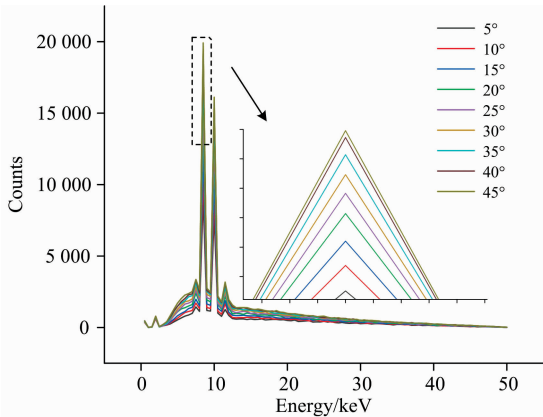


图 3 不同阳极靶角能谱对比

Fig. 3 Comparison of different anode target angle

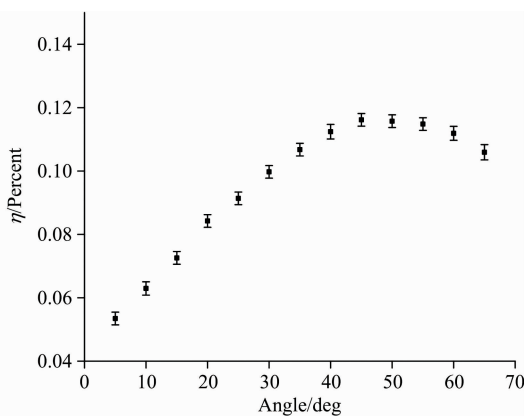


图 4 不同阳极靶角荧光探测率

Fig. 4 Fluorescence detection efficiency of different anode target

## 2.2 最佳荧光靶选择

在三维偏振光学结构中,荧光靶直接影响到对于样品的激发效果。在材料选择上荧光靶的特征 X 射线能量要达到样品的激发条件,即能量需大于待测元素的吸收限。而其材料本身的吸收限又应该在激发电压以内。对于 Cd 元素来说其 K 系 X 射线的吸收限为  $26.71 \text{ keV}$ 。选取 Te 元素作为荧光靶材料其  $K_{\alpha 1}$  射线能量为  $27.19 \text{ keV}$  略大于 Cd 的吸收限能有效的激发出 Cd 的特征 X 射线,而其吸收限能量为  $31.81 \text{ keV}$  在激发电压以内。

在具有荧光靶的正交三维光学结构中,峰背比并不能说明所有问题,所以在进行荧光靶选择时通过信噪比去评估选择更具有意义,因为信噪比可直接与检出限(MDL)相关,具体关系如式(2)和式(3)

$$\text{SNR} = \frac{\text{FlourescenceCounts}}{\sqrt{\text{BackgroundCounts}}} \quad (2)$$

$$\text{MDL} \propto \frac{1}{\text{SNR}} \quad (3)$$

模拟不同厚度、不同管电压下 Te 材料确定在正交三维光学结构中的最佳荧光靶厚度。模拟实验设置了  $10 \sim 300 \mu\text{m}$  间不同的厚度、 $50 \sim 70 \text{ kV}$  间不同管电压,Te 荧光靶出射谱如图 5 所示,具体参数及信噪比(signal-to-noise ratio, SNR)变化情况如表 1、表 2 所示。

表 1 50 kV 下不同荧光靶厚度的 SNR 变化情况

Table 1 SNR of secondary target with different thicknesses at 50 kV tube voltage

| 厚度/ $\mu\text{m}$ | 峰面积   | SNR    | 厚度/ $\mu\text{m}$ | 峰面积   | SNR    |
|-------------------|-------|--------|-------------------|-------|--------|
| 10                | 0.176 | 18.539 | 80                | 0.314 | 21.434 |
| 20                | 0.238 | 20.045 | 100               | 0.319 | 18.298 |
| 30                | 0.273 | 18.798 | 150               | 0.325 | 18.344 |
| 40                | 0.289 | 20.515 | 200               | 0.326 | 17.677 |
| 60                | 0.307 | 20.585 | 300               | 0.325 | 18.654 |

随着荧光靶厚度的增加,Te 的  $K_{\alpha 1}$  归一化峰面积在  $100 \mu\text{m}$  前快速增长,在  $150 \mu\text{m}$  以后基本稳定下来。而信噪比(SNR)变化则较为复杂,在  $80 \mu\text{m}$  以前基本呈上升趋势,在  $80 \mu\text{m}$  达到最大值,而后由于荧光靶的自吸收作用开始有些许下降后稳定。随着管电压的增加 SNR 和归一化峰面积则一直呈上升趋势,且在  $60 \sim 70 \text{ kV}$  间上升明显。在荧光靶选择过程中仅仅由一方面因素去选择荧光靶厚度是不合理的,应该根据不同应用场景选取不同荧光靶厚度。在对测量时间

表 2 200  $\mu\text{m}$  荧光靶下管电压与 SNR 变化情况

Table 2 SNR of different tube voltages at 200  $\mu\text{m}$  secondary target

| 电压/kV | 峰面积   | SNR    |
|-------|-------|--------|
| 50    | 0.326 | 17.677 |
| 55    | 0.353 | 18.186 |
| 60    | 0.376 | 18.884 |
| 65    | 0.389 | 20.366 |
| 70    | 0.398 | 23.665 |

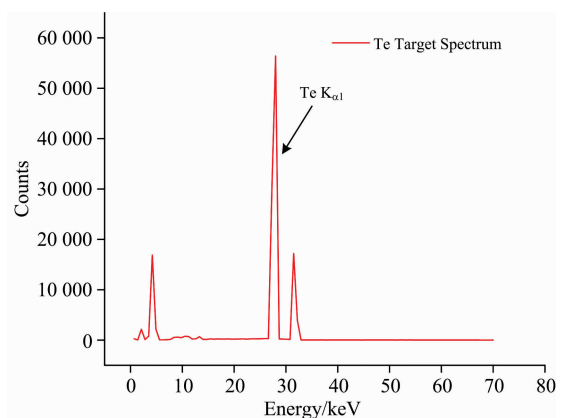


图 5 70 kV 管电压下 Te 靶出射能谱

Fig. 5 Secondary spectrum of Te at 70 kV tube voltage

没有要求时可以选择更大荧光强度的荧光靶，以增加激发效果；在对测量时间有所限制的情况下应选取信噪比更大的厚度，以求能在更短时间内得到更加优异的分析条件。

### 2.3 不同材料荧光靶激发效果讨论

X 射线光管原级谱激发样品与经 Te 靶后激发样品对比结果如图 6 所示，Cd 含量设置为 0.01% 其余均为 C、H 和 O 等轻元素，在原级谱直接激发样品的谱线中可以清晰地看到 X 光管阳极靶材料 W 的 L 系特征 X 射线，以及电子打靶产生的韧致辐射连续谱。在韧致辐射谱上 23.17 keV 处可见 Cd 样品的  $K_{\alpha 1}$  射线其峰背比为 2.29。在能量色散荧光分析中此类情况会给能谱分析带来严重干扰。对比直接通过原级谱激发样品，在通过荧光靶二次激发后的能谱能显著降低韧致辐射连续谱的影响，同时又通过合适的荧光靶材的选择保留甚至优化待测元素特征 X 射线的激发效果。如图 6 所示，通过荧光靶激发 Cd 样品其峰背比可达 8.28，相较于原级谱直接激发样品已经有所提升，但还是难以满足实际分析需求。观察图 6 可发现，Cd 元素的  $K_{\alpha}$  射线已经存在于 Te 元素的  $K_{\alpha 1}$  峰上，且  $K_{\beta 1}$  峰已经完全被淹没。这是由于基体样品中含有大量的轻元素，由荧光靶引入用以激发样品的 Te 元素特征 X 射线被轻元素大量散射，在原峰位 27.47 keV 处仅有少量未被散射的特征 X 射线，被散射形成的散射峰峰位在 26.3 keV 处，相较于 Te 的  $K_{\alpha 1}$  峰左移了 1.17 keV，进而对 Cd 样品的特征 X 射线峰造成较强的背景影响，导致其峰背比下降。

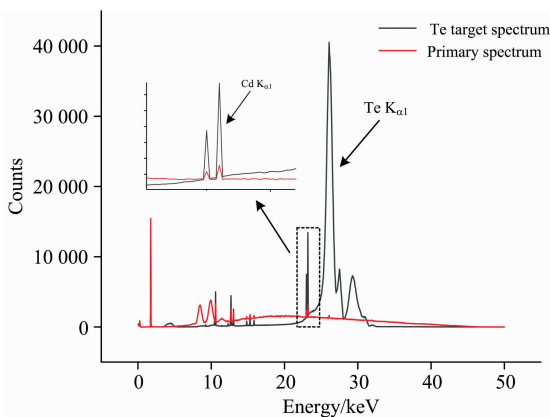


图 6 原级 X 射线与荧光靶激发样品对比  
Fig. 6 Comparison of primary X-ray activated sample and secondary target

选用特征 X 射线能量与 Cd 元素特征 X 射线能量相距更远的 Ba 元素作为荧光靶激发元素。其  $K_{\alpha 1}$  射线能量为 32.19 keV，吸收限为 37.44 keV，能够被原级 X 射线所激发，并且考虑到材料获取的难易度选用  $BaSO_4$  作为荧光靶材料，其结果如图 7 所示。

通过  $BaSO_4$  荧光靶激发 Cd 样品，虽然 Ba 元素的  $K_{\alpha 1}$  峰也由于基体中的轻元素散射，散射峰位左移到 30.5 keV，但是由于其特征能量较高散射部分对于 Cd 元素  $K_{\alpha 1}$  射线影响较小，其峰背比提高到 14.179 较于单金属荧光靶 Te 来说有明显上升。

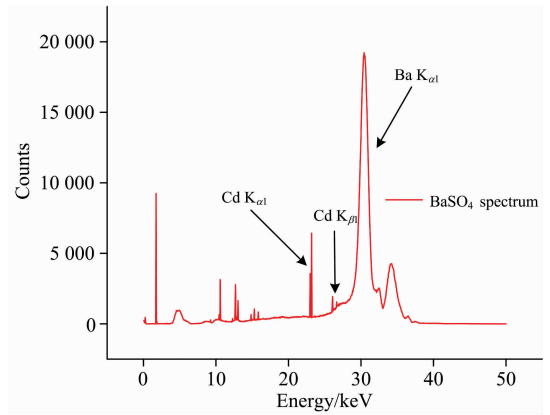


图 7  $BaSO_4$  荧光靶激发样品能谱图  
Fig. 7 Spectrum of  $BaSO_4$  secondary target

### 2.4 不同管电压下样品激发效果

通过 Geant4 程序包模拟不同管电压下  $BaSO_4$  靶出射光谱激发样品结果如图 8 所示。

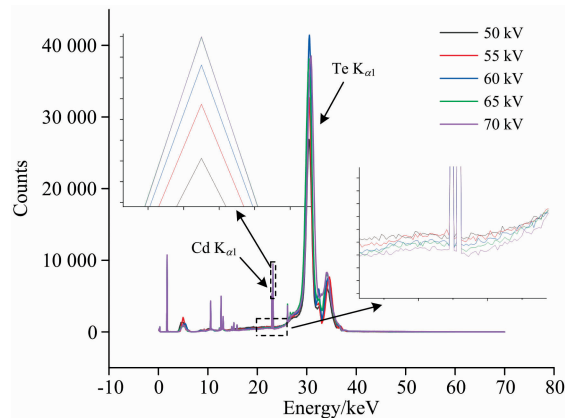


图 8 不同管电压下  $BaSO_4$  靶激发样品能谱图  
Fig. 8 Spectra of  $BaSO_4$  secondary target at different tube voltage

随着 X 射线管管电压的增加，样品中 Cd 元素的  $K_{\alpha 1}$  峰面积随着管电压的增加而增加，而本底计数随着管电压增加而减小。具体变化及峰背比变化如表 3 所示。

表 3 管电压与峰背比变化情况

Table 3 Peak-to-background of different tube voltage

| 电压/kV | 峰面积   | 峰背比    |
|-------|-------|--------|
| 50    | 6 430 | 14.179 |
| 55    | 7 730 | 15.276 |
| 60    | 8 733 | 17.275 |
| 65    | 9 434 | 19.512 |
| 70    | 9 494 | 21.431 |

结合上节所讨论的 50 kV 下  $BaSO_4$  靶激发 Cd 的峰背比变化可以看出，随着管电压的变化，Cd 元素  $K_{\alpha 1}$  峰背比呈上升趋势，且在 70 kV 的管电压下有最佳峰背比 21.431。

### 3 结 论

通过 Geant4 程序包模拟偏振 X 射线荧光探测系统, 将整个测量系统分为三步进行模拟, 既提高了模拟效率又能得到测量系统中间状态针对每一环节具体分析。通过 Geant4 程序包模拟不同阳极靶角、不同管电压下的 X 射线原级能谱, 与实验能谱比较, 验证电子 Geant4 程序在电子打靶过程中的正确性。针对荧光靶选择能有效降低韧致辐射连续谱并且增强待分析元素特征 X 射线强度的特性, 设置不同厚度材料的荧光靶。结果表明在 Te 作为荧光靶材料时无测量时间

要求时选取更大荧光强度的 200  $\mu\text{m}$  的荧光靶, 在有测量时间限制时应考虑 80  $\mu\text{m}$  左右的荧光靶以获取更大 SNR, 以便在更短时间内得到更优异的结果。通过 Te 荧光靶对于含量为 0.01% 的 Cd 元素进行痕量分析时, Cd 元素  $K_{\alpha 1}$  峰背比为 8.28, 这是由于基体轻元素的散射影响 Te 靶 K 系射线会对待测元素 Cd 有较大影响。选取特征 X 射线能量更高的  $\text{BaSO}_4$  作为荧光靶, 在 Cd 含量为 0.01% 的痕量分析过程中其峰背比可达 14.179。通过模拟不同管电压下  $\text{BaSO}_4$  荧光靶对 Cd 样品的激发效果随管电压增加而变好, 在 70 kV 管电压下有最佳峰背比 21.431。

### References

- [1] Guthoff M, Brovchenko O, de Boer W, et al. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A, 2012, 675: 118.
- [2] Standzenieks P, Selin E. Nuclear Instruments and Methods, 1979, 165(1): 63.
- [3] Nancy M Hepp, India C James. X-Ray Spectrometry, 2016, 45(6): 330.
- [4] Abuhani W A, Dasgupta-Schubert N, Cendejas L M V. Power Diffraction, 2014, 29(2): 159.
- [5] I Afşin Kariper, İlknur Üstündag, Kıymet Deniz, et al. Microchemical Journal, 2019, 148: 338.
- [6] Maja D Gajić-Kvaščev, Milica D Marić-Stojanović, Radmila M Jancić-Heinemann. Chemistry Central Journal, 2012, 6: 102.
- [7] Abuhani W A, Dasgupta-Schubert N, Villaseñor L M. Journal of Environmental Radioactivity, 2015, 139: 33.
- [8] Li Ming, Fan Tingting, Huang Jianbo, et al. IOP Conf. Ser.: Earth and Environmental Science, 2021, 687: 012008.
- [9] YU Jie, HONG Xu, MA Ying-jie, et al(喻杰, 洪旭, 马英杰, 等). Spectroscopy and Spectral Analysis(光谱学与光谱分析), 2016, 36(10): 3429.
- [10] Marguí E, Fontàs C, Van Meel K, et al. Analytical Chemistry, 2008, 80(7): 2357.
- [11] CHEN Xi, ZHOU Ming-hui, WU Yan-xiang, et al(陈曦, 周明慧, 伍燕湘, 等). Journal of Food Safety & Quality(食品安全质量检测学报), 2018, (10): 2331.
- [12] ZHANG Li-jiao, TANG Bin, LI Fu-sheng, et al(张丽娇, 汤彬, 李福生, 等). Nuclear Electronics & Detection Technology(核电子学与探测技术), 2019, (2): 173.
- [13] Pedro Amaro, Jose Paulo Santos, Ana Samouco, et al. Spectrochimica Acta Part B: Atomic Spectroscopy, 2017, 130: 60.
- [14] Johnston E M, Byun S H, Farquharson M J. X-ray Spectrometry, 2017, 46(2): 93.

## The Research of Polarized Energy Dispersive X-Ray Fluorescence for Measurement Trace Cadmium by Geant4 Simulation

OUYANG Zhou-xuan, MA Ying-jie, LI Dou-dou, LIU Yi  
Chendu University of Technology, Chendu 610059, China

**Abstract** Primary bremsstrahlung spectrum of X-ray tube has serious influence for trace Cadmium analysis in traditional EDXRF. Secondary targets with different geometry sizes were studied by Geant4 code. To enhance the efficiency of Geant4 simulations, the simulation processes were divided into three stages. In the first stage, primary spectra at different tube voltages were acquired using Geant4 code to simulate electrons of different voltages hitting anode target. In the second stage, Te and  $\text{BaSO}_4$  of different kinds and geometry as secondary target materials, simulated. The simulation results show that when Te, whose  $K_{\alpha 1}$  energy (27.468 keV) closes to the absorption limit of Cd (26.711 keV) is used as the fluorescence target material, the characteristic peak intensity of Te increases rapidly before 100  $\mu\text{m}$  with the increase of target thickness, and tends to be stable after 150  $\mu\text{m}$ . However, the signal to noise ratio (SNR) reaches the maximum value of 21.434 at 80  $\mu\text{m}$ . Due to the self-absorption effect of the secondary target material, SNR declines slightly and becomes stable after reaching the saturation absorption thickness. In different application scenarios, the materials of the secondary target should be various. When there is no limit to the measurement time, the secondary target with greater fluorescence intensity should be selected. But, when the measurement time is relatively short, the secondary target of greater SNR should be selected. In the third stage, output spectra

of the secondary target were used to activate sample containing 0.01% cadmium element. The output spectra of the Te element secondary target were used to activate samples, and the peak-to-background ratio of the  $K_{\alpha 1}$  peak of Cd element was 8.28. The primary spectra were used to activate samples, and the peak-to-background ratio is 2.29. Although it has a great increase, the scattering peak of the Te element always influences the  $K_{\alpha 1}$  peak of the Cd element. The  $BaSO_4$  was selected as secondary target material because the characteristic X-ray energy is farther away from the  $K_{\alpha 1}$  peak of the Cd element. The decrease of the peak-to-background ratio of target element could be weakened caused by the matrix elements of the sample. The peak-to-background ratio is increased to 14.179. The activation effect can be further improved by increasing the tube voltage of the X-ray tube. The optimal peak-to-background ratio of 21.431 could be obtained at the 70 kV tube voltage.

**Keywords** Geant4; Secondary target; Trace analysis; P-EDXRF

(Received Mar. 13, 2021; accepted May 31, 2021)

## 第 22 届全国分子光谱学学术会议暨 2022 年光谱年会 (第一轮通知)

由中国光学学会和中国化学会以及中国光学学会光谱专业委员会主办的“第 22 届全国分子光谱学学术会议暨 2022 年光谱年会”将于 2022 年 11 月 11 日—14 日在云南昆明召开，会议由云南师范大学承办。本次大会是我国光谱科学工作者的又一次学术盛会，将秉承前 21 届分子光谱学学术会议之宗旨，全力展示我国在光谱及相关领域的最新研究进展及取得的成果。同时，会议为增进广大光谱科学工作者及其支持光谱事业的企事业单位的交流与合作搭建平台，共同促进我国光谱事业的发展。届时大会组委会将邀请国内外光谱及相关领域的院士、知名专家学者到会作大会报告，会议还将组织各类专题讨论和学术交流活

### 征文范围

分子光谱理论以应用研究，包括红外光谱、拉曼光谱、荧光光谱、磷光光谱、紫外-可见吸收光谱、化学发光等光谱技术在物理、化学、生物、材料科学、表面/界面科学、医药、环境、工业过程、催化学、地学、农林及其他领域的基础理论与应用研究的最新科研成果。光学工程、原子光谱、激光光谱、光谱成像等各类光谱技术的新理论和应用研究成果。同时也欢迎光谱相关技术新的基础研究和应用成果。

### 论文摘要要求

1. 论文内容必须是未在期刊杂志上发表过或其他全国或国际会议宣读过。
2. 提交论文扩展摘要一份，纸张大小用 A4 纸版式(用 Office word 软件排版，页边距为 2 cm，单倍行距)。
3. 扩展摘要按以下顺序排版：文题(三号黑体居中)；作者(四号仿宋居中)；单位(小四号宋体居中，含所在省市、邮政编码、电子邮址(如有)；论文的创新性，研究意义与结果(五号宋体)；关键词和主要参考文献(自版芯左起，五号宋体)。文稿中可穿插主要论据的图、表和照片，图题、图注和表题、表注一律用英文表述。摘要的字数，包括图，表，参考文献，总共不能超过 2 个页面。
4. 具体投稿要求可参看模板及《光谱学与光谱分析》征稿简则。稿件一经录用，将由《光谱学与光谱分析》以增刊或会议论文集形式发表。论文摘要模板请参考：<http://www.sinospectroscopy.org.cn/uploads/newsfile/20110928105323.doc>
5. 论文摘要截稿日期：2022 年 6 月 30 日。

### 论文摘要提交方式

欢迎大家通过网站提交论文，请您注册登陆光谱网(<http://www.sinospectroscopy.org.cn>)，在会议主页会议会展栏目下的本次会议通道，点击会议投稿按提示要求上传您的论文摘要。论文摘要将组织专家评审或采用网上评审的方式，您可在网上浏览对您论文的评审结果和修改意见。若通过电子邮件方式提交论文，请发往：[ouquanhong@163.com](mailto:ouquanhong@163.com)。

(下转 1082 页)