

01;05;12

## Об определении химического состава методом мультэнергетической радиографии

© С.В. Найдёнов, В.Д. Рыжиков

Институт монокристаллов НАН Украины, Харьков  
E-mail: naydenov@isc.kharkov.com

Поступило в Редакцию 11 ноября 2001 г.

Предложена теоретическая модель мультэнергетической радиографии. Рассмотрены два подхода: „синтез“ и „анализ“ структуры объектов. Теоретически доказано, что с использованием многоканального поглощения восстанавливаются эффективный атомный номер материала и другие характеристики химического состава. Многоэнергетический подход и его обобщения открывают перспективы для экспериментальных и прикладных исследований в области неразрушающего контроля.

Рентгеновское и  $\gamma$ -излучение эффективно используются в области неразрушающего контроля. С развитием цифровых (компьютерных) технологий это направление технической физики получило дальнейшее развитие [1]. Среди современных методов выделяется цифровая радиография. Она предназначена для различения пространственной структуры идентичных или химически отличающихся материалов, совмещенных в одном и том же физическом объекте. В технике это позволяет проводить топографию различных изделий, в том числе электронных микроструктур [2], находить дефекты механических соединений, анализировать их состав. В медицине — отдельно диагностировать состояние костных и мягких тканей [3]. В числе других приложений — опознавать вредные и запрещенные вещества (взрывчатка, наркотики) и др. Особую эффективность демонстрируют разработки 2- и 3-энергетической радиографии, например [4]. В них используются детекторы, регистрирующие взаимодействие  $\gamma$ -квантов с веществом в нескольких диапазонах излучения [1]. Это дает дополнительную информацию о структуре объекта. В традиционном подходе и она используется неполным образом. Это затрудняет, например, количе-

ственное различие веществ с близким атомным номером. В данной работе теоретически доказано, что результаты мультиэнергетической радиографии (MER) можно использовать для количественного определения химического состава произвольного объекта. Ранее для этой цели использовались громоздкие и дорогостоящие нейтронные установки [5]. В зависимости от мультиэнергетической „конфигурации“ мониторинга восстанавливаются различные параметры атомной и пространственной структуры.

Рассмотрим объект прямоугольной геометрии, расположенный перпендикулярно к направлению излучения. При произвольной форме следует рассматривать элементарные параллелепипеды, „вырезаемые“ излучением при поэтапном сканировании образца. Полную толщину  $\Delta$  считаем фиксированной. Ее можно определить, например, с помощью томографии. Основной задачей дальнейшего мониторинга является определение химического состава материалов, содержащихся в объекте. Каждый материал — это простое или сложное вещество. Его атомную структуру идентифицируем эффективным [6] атомным номером  $Z_{eff}$ , плотностью  $\rho$  и относительными (атомными) концентрациями  $a_k$  ( $k = 1, \dots, P$ ;  $\sum_k a_k = 1$ ) простых элементов. В общем случае необходимо также провести пространственное разделение, т.е. установить толщины элементарных слоев  $\Delta_j$  ( $j = 1, \dots, Q$ ;  $\sum_j \Delta_j = \Delta$ ), образованных различными компонентами — материалами или отдельными предметами составного объекта. Ограничимся монослойным случаем, хотя многоэнергетический подход позволяет рассмотреть и многослойные объекты. Последним упрощением будет предположение о фиксированных значениях энергии  $E_i$  ( $i = 1, \dots, N$ ) регистрируемого  $\gamma$ -излучения. Немонохроматический разброс в пределах каждого диапазона влияет на эффективность регистрации, но не на сам метод. На практике используются немонахроматические источники с отсечкой диапазонов с помощью системы фильтров.

Физической основой радиографии является поглощение ионизирующего излучения в веществе. Для  $\gamma$ -квантов — это процессы фотоэффекта, комптоновского рассеяния и рождения пар. Их парциальные сечения рассеяния известны теоретически [7] и экспериментально [8]. Поглощение происходит в исследуемом объекте и в детекторе излуче-

ния. Регистрируется сигнал  $V$ :

$$V_i = V(E_i) = \eta(E_i)V_0 \exp\left[-\sum_{j=1}^Q \mu_{ij}\Delta_j\right]; \quad \mu_{ij} \equiv \mu(E_i; Z_{eff,j}), \quad (1)$$

где  $\eta$  — конверсионная эффективность детекторов;  $V_0$  — мощность источника (или показания в фоновом режиме);  $\mu_{ij}$  — парциальные коэффициенты ослабления объектом,  $Q$  — число его компонент (или слоев). Оцифровка сигнала позволяет получать результаты измерений в любом удобном масштабе. Введем логарифмическую интенсивность  $I = \ln(\eta V_0/V)$ . Уравнения радиографии примут линейный вид. При согласовании  $N = Q$  с порядком  $N$  мультиэнергетичности получим (по повторяющемуся индексу выполнено суммирование):

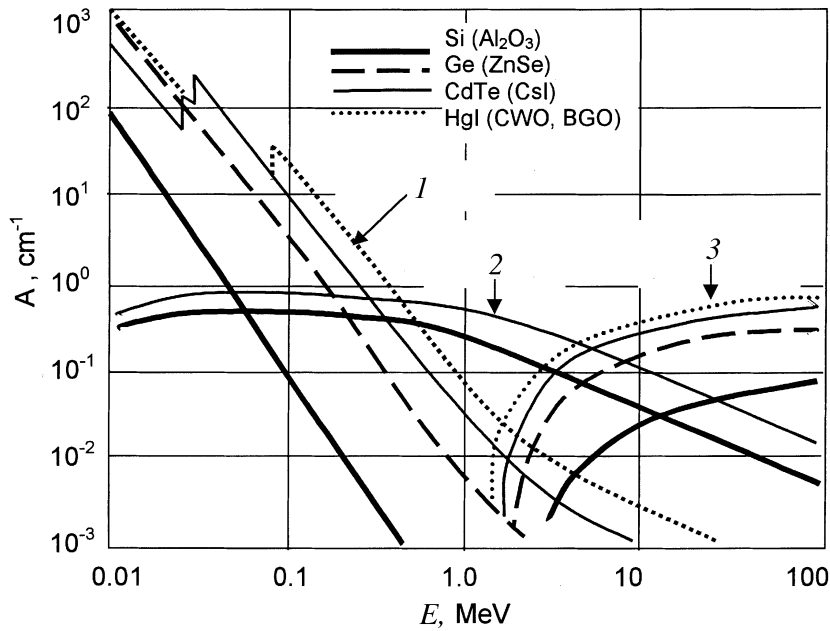
$$I_i = \mu_{ij}\Delta_j; \quad \mu_{ij} = \rho_j[\tau(E_i)Z_{eff,j}^A + \sigma(E_i)Z_{eff,j} + \chi(E_i)Z_{eff,j}^2];$$

$$i, j = 1, \dots, N, \quad (2)$$

$$\mu_{ij} \equiv \rho_j \left[ \tau(E_i) \sum_{k=1}^P a_{jk}Z_k^A + \sigma(E_i) \sum_{k=1}^P a_{jk}Z_k + \chi(E_i) \sum_{k=1}^P a_{jk}Z_k^2 \right], \quad (3)$$

где  $\tau$ ,  $\sigma$  и  $\chi$  — универсальная (не зависящая от рода вещества) энергетическая зависимость поглощения для фото-, комптон- и эффекта рождения пар;  $P$  — число химических компонентов объекта (или простых элементов сложного соединения). В области  $0.01 \text{ MeV} \gtrsim E \gtrsim 0.5 \text{ MeV}$ , используемой в большинстве приложений, доминируют  $\tau$  и  $\sigma$ . В радиографии крупных объектов используется высокоэнергетичное излучение ускорителей и основными будут  $\sigma$  и  $\chi$ . Характерное поведение коэффициентов ослабления показано на рис. 1.

В традиционном подходе изображение объекта синтезируется из „фантомов“, соответствующих материалам с эталонными свойствами (схематически это показано на рис. 2), т.е. для любого объекта считаются заданными значения коэффициентов поглощения  $\mu_{ij}$  при энергиях, регистрируемых каждым детектором многоэнергетической сборки. В качестве базиса выбираются наиболее типичные вещества в каждом классе соединений. Например, в 2-энергетической медицинской радиографии — фосфат кальция  $Z_{eff}[\text{Ca}_3(\text{PO}_4)_2] = 17.38$  (костная ткань) и вода  $Z_{eff}[\text{H}_2\text{O}] = 7.95$  (мягкая ткань). В технике — углерод  $Z_L = 6$  (органика) и железо  $Z_H = 26$  (неорганика). В более

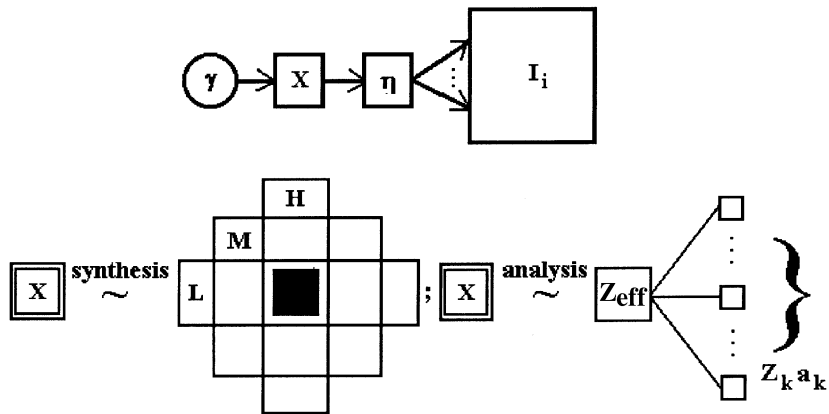


**Рис. 1.** Линейные коэффициенты ослабления различных каналов поглощения (фото (1), комтон (2), рождения пар (3)) для сцинтилляторов, используемых в детекторах радиографии. Очевидна универсальность энергетических зависимостей и разграничение роли каналов при средних и высоких энергиях.

точной 3-радиографии выделяются три диапазона: вещества с низким  $1 < Z_L < 10$ , средним  $10 < Z_M < 18$  и высоким  $18 < Z_H < 40$  атомным номером. От неправильного выбора базиса ( $Z_H, Z_M, Z_L$ ) зависят ошибки при восстановлении компонент объекта. Например, вместо образов с низким  $Z_{eff}$  можно „синтезировать“ изображение предмета меньшей толщины, но с более высоким  $Z_{eff}$ . Ошибки возрастают при различении материалов с близкими  $Z_{eff}$ .

Вместо исходных данных  $I_i$  введем вспомогательные  $I'_i = D_{ii}I_i$  и потребуем

$$I'_i = D_{ii}\mu_{ij}\Delta_j = (D_1\Delta_1; \dots; D_N\Delta_N). \quad (4)$$



**Рис. 2.** Схема мультиэнергетической радиографии и способов восстановления структуры объекта  $X$ . „Синтез“ фрагмента изображения объекта производится из трех образов типичных материалов с низким  $L$ , средним  $M$  и высоким  $H$  атомным номером  $Z$ . „Анализ“ соответствует распределению  $Z_{eff}$  объекта по парциальным долям  $Z_k a_k$ .

Это означает пространственное разделение образов с базисными  $Z_{eff,j}$  и  $\rho_j$ . Значения каждого  $I'_j$  соответствуют содержанию в объекте соединения  $j$ -го типа. Параметры  $D_j$  определяются однозначно. Соотношения (4) фиксируют  $N(N-1)$  из  $N^2$  неопределенных коэффициентов матрицы  $D_{ii'}$ . Недостающие связи соответствуют масштабной инвариантности линейных зависимостей  $I \propto I'$ . Любые  $N$  коэффициентов (или их комбинаций) в  $D_{ii'}$  можно выбрать произвольно. (Этот выбор неоднозначен, от него также зависит эффективность в распознавании образов компонентов объекта). В результате  $I'_i$  зависят только от данных мониторинга  $I_i$ . Для 2-радиографии (с выбором  $D_{12} = D_{22}$ ) получим

$$I_H = I'_1 = \frac{\mu_{2H}}{\mu_{1H}} I_1 - I_2; \quad I_L = I'_2 = I_2 - \frac{\mu_{2L}}{\mu_{1L}} I_1; \\ \mu_{iH,L} = \mu(E_i; Z_{H,L}); \quad i = 1, 2. \quad (5)$$

Для 3-радиографии подобные выражения ( $I'_L; I'_M; I'_H$ ) более громоздки. В общем случае получаются замкнутые зависимости  $I'_j = f_j(I_i; \mu_{ij})$ ;  $\Delta_j = \mu_{ji}^{-1} I_i$ , где  $\mu^{-1}$  — обратная матрица. Для определения  $\Delta_j$

необходимо  $\det \mu_{ij} \neq 0$ , что влечет  $E_i \neq E_{i'}$  при  $i \neq i'$ . Для моно-энергетической радиографии разделение образов, соответствующих  $Z_H$  и  $Z_L$ , невозможно. При  $E_1 = E_2$  получим  $I_H = -I_L = I_1 - I_2 \equiv 0$ , так как  $I_1 = I_2$ . Используя цифровые данные  $I'_j \sim \Delta_j$ , на компьютере реконструируется изображение объекта и (толщин) его отдельных компонент.

В предыдущем подходе отсутствовал количественный способ определения параметров  $Z_{eff}$ ,  $\rho$  и  $a_k$ . „Синтез“ структуры объекта носит качественный характер, так как при этом определяется только то, какими, большими  $Z_H$ , средними  $Z_M$  или малыми  $Z_L$ , он характеризуется. Если объект состоит из материалов с близкими  $Z_{eff,1} \simeq Z_{eff,2}$ , то различить их будет практически невозможно или потребуются слишком высокая мультиэнергетичность, что приведет к техническим осложнениям. Используем результаты радиографии для „анализа“ структуры. Фиксируем толщину объекта  $\Delta$  и введем плотность навески  $\varrho_j = \rho_j \Delta$ . Выберем диапазоны излучения таким образом, чтобы хотя бы на одной энергии были существенны, как минимум, два канала поглощения. Для этого потребуются соответствующая подстройка детекторов излучения. Подобрать их параметры (и сцинтилляторы) возможно. Многоканальность радиографии — необходимое условие мониторинга химического состава. Одной мультиэнергетичности для этого недостаточно. Характер поглощения и зависимость от  $Z_{eff}$  в разных каналах различные. Это позволяет извлечь не только качественную, но и количественную информацию о соответствующей структуре объекта.

Выделим два случая — „грубый“ 2-мониторинг, когда определяются параметры  $Z_{eff}$  и  $\varrho$ , и „точный“, когда восстанавливаются концентрации  $a_k$  для набора из  $P$  компонентов. Для решения задачи необходимо согласование с мультиэнергетичностью,  $N = P$ . Исходим из уравнений

$$I_i = \tau(E_i)z_\tau + \sigma(E_i)z_\sigma; \quad i = 1, 2; \quad z_\tau = \varrho Z^A, \quad z_\sigma = \varrho Z; \quad Z \equiv Z_{eff}; \quad (6)$$

$$I_i = \lambda_{ik} a_k; \quad \lambda_{ik} = \varrho [\tau(E_i)Z_k^A + \sigma(E_i)Z_k]; \quad i, k = 1 \dots, N, \quad (7)$$

где учтены только фото- и комптоновский каналы. Аналогично можно получить уравнения для 3-канальной радиографии, включающей канал рождения пар. Отметим без вывода, что в 3-канальной 3-энергетической радиографии можно полностью восстановить пространственную и атомную структуру объекта, независимо определив атомный номер  $Z_{eff}$ , плотность  $\rho$  и толщину  $\Delta$ . Решения уравнений (6)–(7) легко получить.

Для того чтобы они были замкнутыми, необходимо исключить все величины, не зависящие от результатов радиографии. Это можно сделать, выполнив тестовые измерения на образцах известного состава и геометрии ( $Z_j^*$ ,  $\rho_j^*$ ,  $\Delta_j^*$ ). В результате энергетические коэффициенты  $\tau$ ,  $\sigma$  и зависимости  $\lambda$  выражаются через калибровочные данные  $C_{ij} = I(E_i; Z_j^*, \rho_j^*, \Delta_j^*)$ . Всего при  $N$ -радиографии должно быть выполнено  $N^2$  таких измерений. Для 2-радиографии достаточно четырехмерного базиса. Опуская промежуточные выкладки, приведем ответ для "грубого" мониторинга (при средних энергиях):

$$Z_{eff} = Z_{eff}(I_1, I_2) = \sqrt[3]{\frac{Z_1^{*4} \varrho_1^*(C_{12}I_2 - C_{22}I_1) - Z_2^{*4} \varrho_2^*(C_{11}I_2 - C_{21}I_1)}{Z_1^* \varrho_1^*(C_{12}I_2 - C_{22}I_1) - Z_2^* \varrho_2^*(C_{11}I_2 - C_{21}I_1)}}, \quad (8)$$

$$\varrho = \varrho(I_1, I_2) = \frac{Z_1^* \varrho_1^*(C_{12}I_2 - C_{22}I_1) - Z_2^* \varrho_2^*(C_{11}I_2 - C_{21}I_1)}{(C_{11}C_{22} - C_{12}C_{21})} \left( \frac{1}{Z_{eff}} \right). \quad (9)$$

Простые, но громоздкие выражения для характеристик „точного“ мониторинга здесь не приводим. Решения (8), (9) существуют при выполнении условий

$$C_{11}C_{22} - C_{12}C_{21} \neq 0; \quad Z_1^* \neq Z_2^*, \quad (10)$$

которые требуют разнесения диапазонов регистрируемого излучения и выбора контрольных образцов различного состава. Радиографию химического состава следует проводить в два этапа. Вначале определить „грубую“ структуру объекта, соответствующую результатам (9), (10). Затем, взяв близкие значения  $Z_k \simeq Z_{eff}$ , уточнить содержание  $a_k$  простых элементов, в основном определяющих эффективный атомный номер. При необходимости, выбирая другие базисные  $Z_k \leq Z_{eff}$ , установить содержание менее существенных элементов. Если эффективный атомный состав уже установлен, то дополнительная  $N$ -радиография обеспечит информацию и о толщинах отдельных  $N$  компонент объекта. Используя возможности компьютерных технологий, все описанные процедуры можно проводить одновременно.

Таким образом, многоканальная мультэнергетическая радиография позволяет определить структурные параметры многокомпонентных объектов и химически различить входящие в них соединения с близким атомным составом. С увеличением числа каналов и энергий регистрации (но не менее двух) увеличивается число структурных параметров,

доступных к восстановлению. Это открывает перспективы к использованию такого подхода в эксперименте и прикладных технических исследованиях в области неразрушающего контроля.

## Список литературы

- [1] 15th World Conference on Non-Destructive Testing (Session of Methods and Instrumentation). Rome (Italy), 15–21 October, 2000. Abstracts Book. 800 p.
- [2] *Астрова Е.В., Ременюк А.Д., Ткаченко А.Г., Шульпина И.Л.* // Письма в ЖТФ. 2000. Т. 26. В. 24. С. 31–38.
- [3] *Harrison R.M.* // Nucl. Instr. and Meth. 1991. V. A310. P. 24–34.
- [4] *Heimann Systems*. Prospects. Germany, 2001; available on Internet web-site (<http://www.heimannsystems.com>).
- [5] *Grodzins L.* // Nucl. Instr. and Meth. 1991. V. B36/37. P. 829–833.
- [6] *Иванов В.В.* Курс дозиметрии. М.: Атомиздат, 1978. 392 с.
- [7] *Берестецкий В.Б., Лифшиц Е.М., Пятаевский Л.П.* Квантовая электродинамика. М.: Наука, 1989. Т. 4. 728 с. [Курс Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика (в 10 т.)].
- [8] *Немец О.Ф., Гофман Ю.В.* Справочник по ядерной физике. Киев: Наукова думка, 1975.