

文章编号: 2095-4980(2022)09-0978-06

X 射线辐照下材料电子发射特性的模拟

赵 伟, 何佳龙

(中国工程物理研究院 流体物理研究所, 四川 绵阳 621999)

摘 要: 稳态 X 射线管是一种重要的 X 射线辐照模拟装置, 在辐照效应等研究领域有重要应用。采用蒙特卡罗模拟方法计算了 50 kV, 150 kV 和 225 kV 管电压下的 X 射线能谱, 并对 X 射线辐照下电子发射进行了模拟; 研究了准直孔直径分别为 2 mm, 4 mm 和 6 mm 条件下 X 射线的焦斑分布和电子发射弥散情况, 以及不同能谱的 X 射线轰击到聚乙烯、聚酰亚胺、Si、SiO₂、Cu、Ta 和 W 等样品上产生的电子发射能谱和电流强度等特性, 为 X 射线辐照下材料电子发射特性的实验研究和设计提供一定的理论基础和指导。

关键词: X 射线; X 射线能谱; 电子能谱; 电子流强; 蒙特卡罗模拟

中图分类号: O536

文献标志码: A

doi: 10.11805/TKYDA2020096

Simulation of electron emission characteristics of materials induced by X-ray irradiation

ZHAO Wei, HE Jialong

(Institute of Fluid Physics, China Academy of Engineering Physics, Mianyang Sichuan 621999, China)

Abstract: Steady-state X-ray source is an important radiation simulation device, which has important applications in research fields such as radiation effects. Electron emission occurs when X-ray bombards the target. Long-term bombarding will cause the accumulation of charge on the surface of the material or the effect of electron multiplication, which will lead to the change of material properties. The Monte Carlo simulation method is applied to calculate the X-ray energy spectrum at tube voltages of 50 kV, 150 kV and 225 kV, and the electron emission under X-ray irradiation is simulated. The focal spot distribution of X-ray and the dispersion of electron emission with collimating hole diameters of 2 mm, 4 mm and 6 mm are studied respectively, and the characteristics of electron emission energy spectrum and current intensity generated by X-ray bombardment of different energy spectra on samples such as polyethylene, polyimide, Si, SiO₂, Cu, Ta and W are also studied, which can provide theoretical basis and guidance for the experimental research and design of electron emission characteristics of materials under X-ray irradiation.

Keywords: X-ray; X-ray spectrum; electron spectrum; electron current; Monte-Carlo simulation

X 射线在电子元器件辐照效应、抗核加固设计和无损检测成像等研究领域中具有广泛的应用^[1-2]。在太空环境中, 太阳耀斑爆发期间, 航天器会受到强剂量的 X 射线辐照, 其电子元器件等会受到一定的影响, 导致航天器的功能受到影响。在强 X 射线辐射的核科学技术研究中, 如核爆, X 射线辐射的能量比例高达 70%~85%, 应用于核辐射测量和电子系统的材料、电子元器件和集成电路, 特别是半导体和微电子器件等在强 X 射线辐照下性能会受到很大的影响, 导致测量不确定度增大, 甚至失效^[3-5]。在电力设备无损检测中, 如气体绝缘组合电器设备、断路器和互感器等, X 射线成像技术已得到广泛应用。但大剂量的 X 射线辐照也会使设备中绝缘材料的电气性能发生改变, 导致局部放电等现象^[6-8]。

目前, 对于 X 射线辐照导致材料性能改变的研究主要为电子元器件的辐照效应、电学性质分析与抗核加固技术研究、绝缘材料介电性质的实验测量与分析等。几十至几百 keV 能量的 X 射线辐照材料时, X 射线通过与物质的光原子反应, 主要包括光电效应和康普顿散射(非相干散射), 产生次级电子, 这些次级电子在材料表面会产生

积累或电子倍增等效应。当进行长时间X射线辐照时，材料的性质会产生改变。本文通过蒙特卡罗模拟方法研究X射线辐照下多种材料的电子发射特性，为X射线辐照下材料改性研究提供一定的理论基础，也为材料电子发射特性的实验设计与测量提供理论指导。

1 计算模型

根据材料电子发射特性测量装置的一般分布，计算模型的示意图如图1所示，主要包括X射线源、准直器和辐照样品。本文采用的X射线辐照源为稳态的钨靶X射线管，管电压最大为225 kV，管电流为10 mA；出射窗采用对X射线吸收很弱的Be窗。由于不同管电压条件下，X射线的能谱不一样，在材料中的穿透深度和光原子反应也有差异，导致材料电子发射特性改变，因此本文研究50 kV、150 kV和225 kV管电压条件下X射线的输出特性与辐照后材料的电子发射特性。准直器将X射线锥形束整形为一个近似的平行窄束，使X射线只辐照到样品上；准直器同时也是屏蔽体，吸收其他方向的X射线及其散射线，尽可能减少X射线辐照到其他测量设备上。因此，准直器采用铅材料。准直器的孔径会对X射线束辐照焦斑产生影响，本文对2 mm、4 mm和6 mm直径的准直孔分别进行模拟。样品材料包括常用的绝缘材料聚乙烯、聚酰亚胺；电子元器件常用的半导体材料Si及其氧化物SiO₂；常用金属材料Cu(低原子序数)和W(高原子序数)。样品为直径20 mm，厚度1 mm的圆柱体。

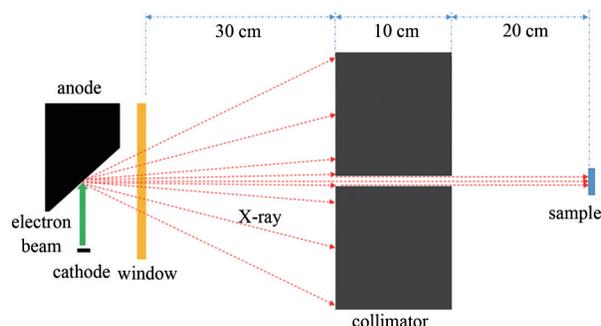


Fig.1 Schematic of the simulation model
图1 计算模型示意图

采用蒙特卡罗模拟软件MCNP(Monte Carlo N Particle Transport Code)^[9]对计算模型进行建模。MCNP软件的一个完整计算模型包括：粒子源、靶、物理模型和数据记录，其中物理模型是计算的理论基础。本文的物理模型主要包括光子的光电效应、康普顿散射和相干散射等、电子的电离、韧致辐射和多次散射等。

由于样品和X射线管的间距较大，且准直孔的直径很小，为提高模拟计算效率，采用分段模拟再进行耦合计算的方法。第一段模拟：X射线源在样品位置处的X射线强度、能谱分布和空间分布特性；第二段模拟：X射线辐照样品产生的次级电子发射能谱和产额。结合第一段样品处X射线的强度和第二段样品的电子发射产额，可以得到样品的次级电子发射电流。

由于样品和X射线管的间距较大，且准直孔的直径很小，为提高模拟计算效率，采用分段模拟再进行耦合计算的方法。第一段模拟：X射线源在样品位置处的X射线强度、能谱分布和空间分布特性；第二段模拟：X射线辐照样品产生的次级电子发射能谱和产额。结合第一段样品处X射线的强度和第二段样品的电子发射产额，可以得到样品的次级电子发射电流。

2 模拟结果与分析

2.1 X射线的输出特性

1) X射线能谱分布

X射线管产生X射线的基本原理是阴极通过热发射等方式产生电子，电子在阴极和阳极之间电场的作用下进行加速，最后轰击到阳极靶上，通过韧致辐射作用产生一个连续的能谱，同时也通过与原子壳层电子的电离作用产生特征X射线^[10-11]。在MCNP模拟中，根据不同管电压设置对应的入射电子能量，电子轰击钨靶后产生X射线，并经Be窗过滤后，得到X射线的能谱分布，如图2所示。从图2可见，150 kV和225 kV管电压下，X射线的能谱包括一个连续能谱和钨的2个K层特征X射线峰，而50 kV管电压对应的X射线能谱只有一个连续的韧致辐射谱；管电压越高，输出的X射线平均能量也越高，且产额也明显高很多。

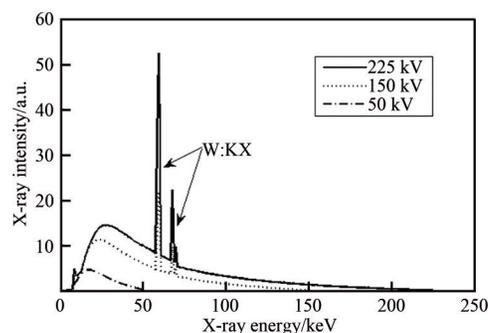


Fig.2 X-ray spectra at various tube voltages
图2 不同管电压下X射线能谱分布

2) X射线的焦斑特性

本文采用的稳态X射线管的焦斑相比准直孔大很多，因此X射线束经过准直器之后，其焦斑大小主要取决于准直孔的大小，但具有一定的扩散。图3为225 kV管电压下的X射线束经过准直器后在样品处的焦斑分布。图3(a)为X射线经过6 mm准直孔之后强度在焦斑径向上的分布，其中FWHM(Full Width of Half Maximum)表示分布的半高宽，即强度峰值50%对应的宽度。由图可见焦斑大小比准直孔略大，在直径8 mm的圆形区域内几乎是均匀分布的，FWHM约为9 mm。图3(b)为经过2 mm和4 mm准直孔后的焦斑大小，其FWHM分别为3 mm和

5 mm。同时计算 150 kV 和 50 kV 管电压下，X 射线经过不同直径的准直孔后的焦斑大小，结果表明焦斑大小和 225 kV 相同，即焦斑大小只和准直孔大小有关，与 X 射线的能谱无关。综合 X 射线能谱和焦斑分布，可以得到样品位置处 X 射线的输出特性，如表 1 所示。可见准直孔越小，样品位置处 X 射线的强度越小，2 mm 准直孔的 X 射线强度比 6 mm 准直孔的 X 射线强度小了约 10 倍；另一方面，管电压越低，X 射线的强度也越低。

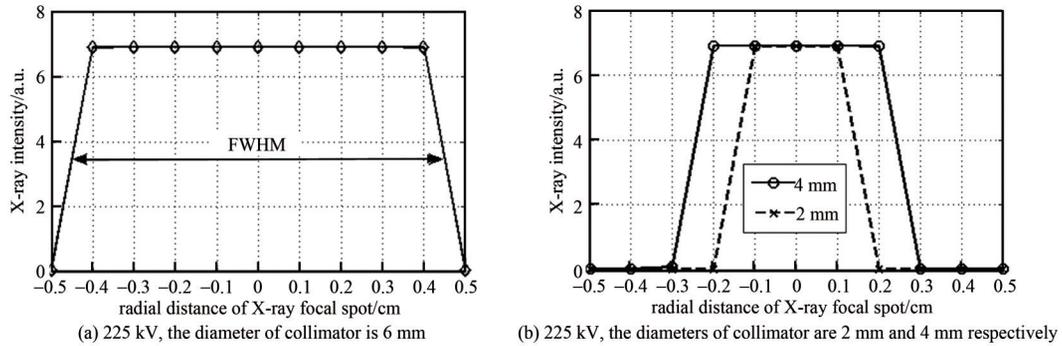


Fig.3 The focal spot of 225 kV X-ray beam passing through 2 mm, 4 mm and 6 mm collimating hole at the location of sample
图3 样品位置处 225 kV 的 X 射线束经过 2 mm, 4mm 和 6 mm 准直孔后的焦斑分布

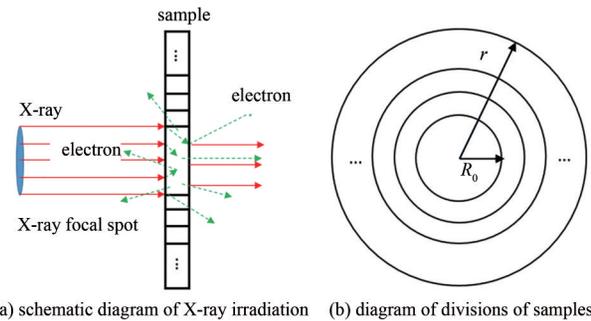
表 1 样品位置处的 X 射线输出特性

Table1 X-ray characteristics at the position of sample

collimation hole diameter/mm	focal spot FWHM/mm	X-ray intensity/($\times 10^8$ X-rays/s)		
		50 kV	150 kV	225 kV
2.0	3.0	2.71	15.31	26.28
4.0	5.0	7.95	44.94	77.13
6.0	9.0	26.80	151.57	260.15

2.2 材料的电子发射特性

在材料的电子发射特性模拟中，X 射线的能谱分别采用 2.1 节中计算得到的能谱，焦斑采用表 1 中的半高宽值。即 X 射线圆形面源垂直入射到材料样品上，如图 4(a) 所示。能量为几百 keV 以下的 X 射线与物质作用，主要通过光电效应和康普顿散射等方式产生次级电子，而电子在样品中会通过弹性和非弹性散射作用不断散射，因此除了在样品的焦斑辐照区域内会有电子发射，在焦斑的邻近区域也可能会有电子出射，即电子出射空间分布也有弥散。如图 4(b) 所示，在模拟时，将样品划分为焦斑辐照区域，邻近区域每隔 1 mm 划分为一个个圆环，来研究电子出射的扩散情况。



(a) schematic diagram of X-ray irradiation (b) diagram of divisions of samples
Fig.4 Schematic diagrams of electron emission induced by X-ray irradiation and divisions of electron recording areas
图 4 X 射线辐照样品产生电子发射示意图和样品的电子记录区域划分示意图

225 kV 管电压，6 mm 准直条件下(即 X 射线辐照焦斑 9 mm)，X 射线束对半导体 Si 样品进行辐照，同时统计 Si 样品在 X 入射面和背面记录到的次级电子发射能谱，结果见图 5(a)。可见背面出射电子的平均能量和峰值能量都要略高于入射面出射的电子，且能量主要集中在 50 keV 以下的低能量区间，入射面的电子能谱偏软，而背面出射的电子能谱偏硬。入射面电子发射沿 Si 样品径向 r 的分布见图 5(b)，可见电子基本是在辐照焦斑的区域内发射(约为 98.6%)，只有很少一部分扩散到了临近区域。入射面和背面发射次级电子的效率分别为： 2.74×10^{-4} 和 3.15×10^{-4} ，结合表 1 的 X 射线在样品位置处的辐照强度，可以得到发射电子的电流分别为 1.14 pA 和 1.31 pA。

50 kV 和 150 kV 条件下，Si 样品的电子发射能谱如图 6 所示，可见管电压越低，X 射线能谱的能量也越低，导致穿透 Si 样品的能力降低，因此入射面的电子发射相对更高，背面的电子发射相对降低；而峰值能量变化很小，基本在 10 keV 左右。发射电子的电流如表 2 所示，由表中结果可见，随着 X 射线能量降低，发射电子的电流降低，且对于 Si 样品，入射面和背面发射电子的电流基本相当，因此，在电流测量中需要注意发射电子电流的来源。表 2 中还列出了准直孔直径分别为 2 mm 和 4 mm 条件下，Si 样品入射面和背面电子发射的流强，可见准直孔大小对电子发射电流的影响很大，这主要是由于准直孔的大小决定了辐照样品的 X 射线强度，和表 1 的比例基本吻合。

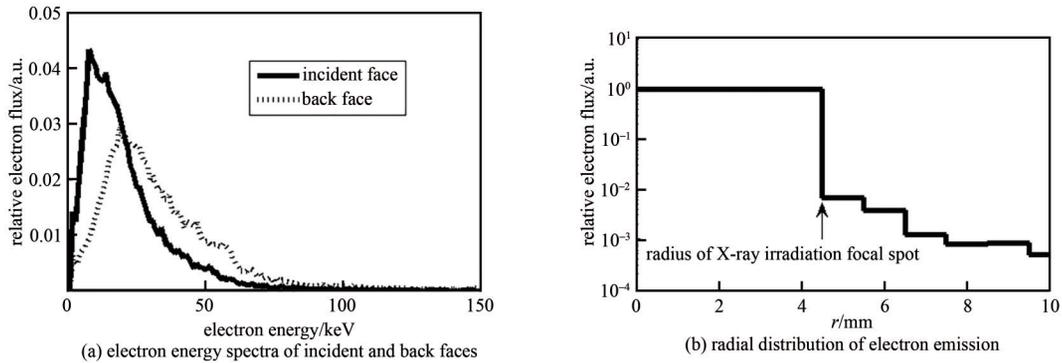


Fig.5 Electron emission distributions of Si when the tube voltage is 225 kV
图 5 225 kV 条件下 Si 样品电子发射的能谱和空间分布

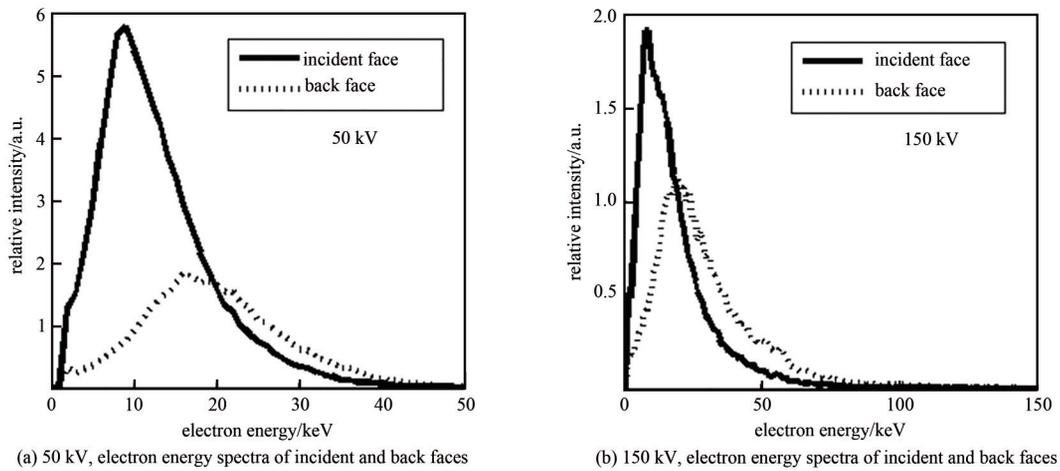


Fig.6 Electron emission distributions of Si at the tube voltage of 225 kV
图 6 50 kV 和 150 kV 条件下 Si 样品电子发射的能谱分布

表 2 不同样品的次级电子发射电流

Table2 Current of secondary electron emission from various kinds of samples

sample	collimation hole/mm	electron current/pA					
		incidence face			back face		
		50 kV	150 kV	225 kV	50 kV	150 kV	225 kV
Si	2.0	0.03	0.09	0.12	0.02	0.08	0.13
	4.0	0.10	0.26	0.34	0.04	0.24	0.39
	6.0	0.32	0.89	1.14	0.15	0.81	1.31
SiO ₂	2.0	0.01	0.04	0.05	0.01	0.05	0.08
	4.0	0.39	0.11	0.14	0.32	0.14	0.22
	6.0	0.13	0.37	0.48	0.11	0.47	0.76
Cu	2.0	0.24	0.74	1.00	0	0.08	0.19
	4.0	0.70	2.18	2.94	0.001	0.24	0.56
	6.0	2.36	7.34	9.89	0.01	0.81	1.86
Ta	2.0	0.550	1.980	2.940	0	0.003	0.030
	4.0	1.600	5.810	8.620	0	0.010	0.100
	6.0	5.400	19.600	29.100	0	0.030	0.330
W	2.0	0.56	2.02	2.99	0	0.002	0.02
	4.0	1.64	5.92	8.76	0	0.01	0.07
	6.0	5.52	20.00	29.50	0	0.02	0.22
polyethylene	2.0	0.000 2	0.001 0	0.001 0	0.001 0	0.010 0	0.020 0
	4.0	0.001 0	0.002 0	0.003 0	0.002 0	0.030 0	0.040 0
	6.0	0.002 9	0.010 0	0.010 0	0.050 0	0.080 0	0.140 0
polyimide	2.0	0.002	0.010	0.010	0.003	0.010	0.030
	4.0	0.010	0.020	0.020	0.010	0.040	0.070
	6.0	0.020	0.050	0.070	0.030	0.130	0.250

当准直孔直径为 6 mm 时，不同管电压条件下，X 射线辐照引起的 Cu 和 W 两种金属材料的次级电子发射能谱如图 7 所示。可见，对于 Cu 样品，随着 X 射线能量降低，X 射线穿透能力降低，背面出射的电子也越来越少，50 kV 管电压下的 X 射线穿透样品的概率已经很低，如表 2 所示，其电子发射流强仅为 0.005 pA；而对于 W 样品，50~225 kV 管电压下的 X 射线几乎都不能穿透，因此背面电子发射的流强近似为 0 pA。相比于 Si，在相同条件下，Cu 和 W 样品在入射面的次级电子发射电流要大很多，这是由于 X 射线与物质的光电效应反应截面和康普顿散射的截面都与原子序数正相关，即原子序数越大，光电子和康普顿散射电子等次级电子发射的几率越大。Ta 的原子序数($Z=73$)和 W($Z=74$)相当，因此 Ta 的次级电子发射和 W 也基本相当，其发射电流如表 2 所示。

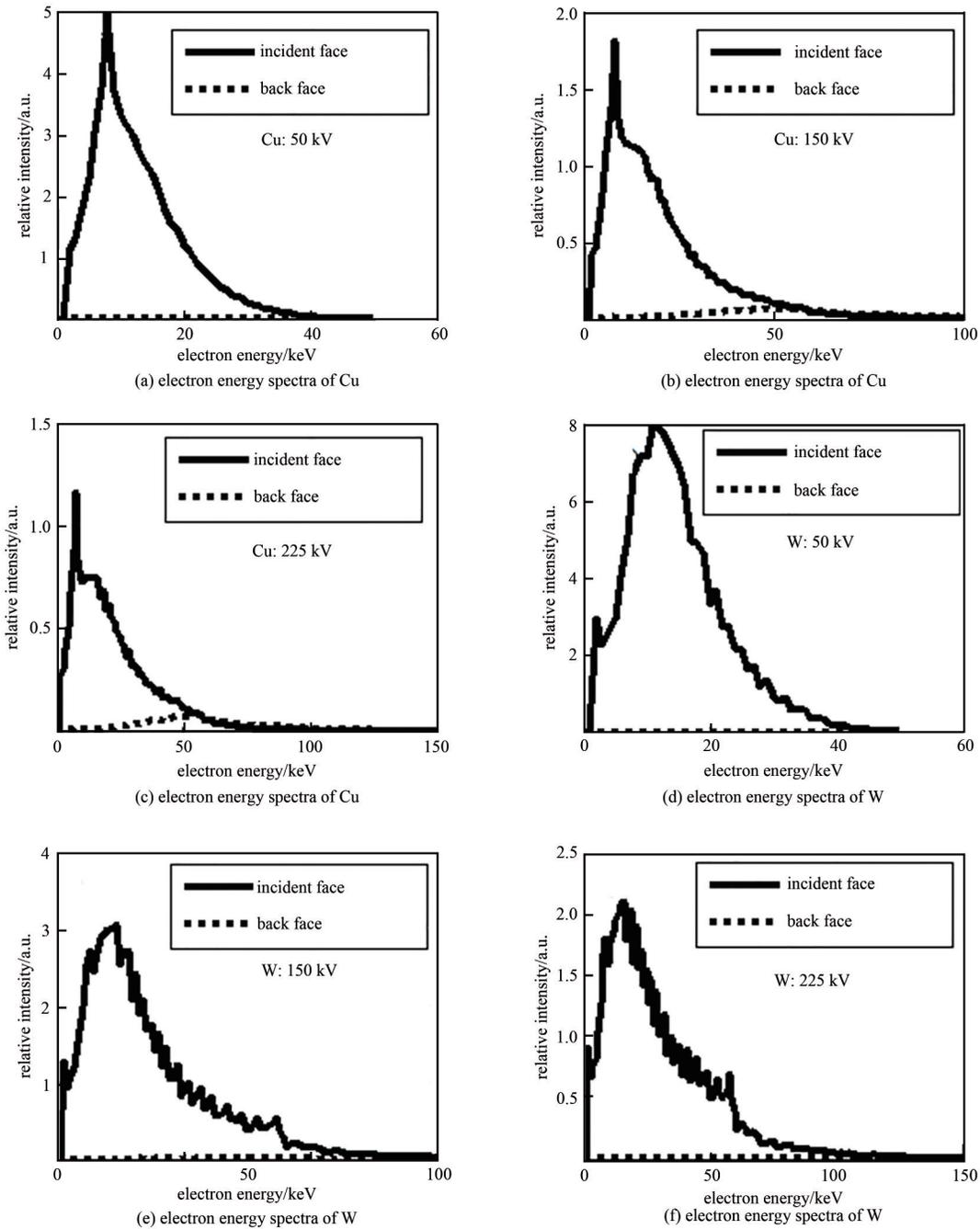


Fig.7 Electron emission spectra of Cu and W at various tube voltages

图 7 不同管电压下 Cu 和 W 的电子发射能谱

绝缘材料聚乙烯和聚酰亚胺为含 H,C 和 N 等轻元素的材料，密度较低，因此与 X 射线相互作用的截面较小，次级电子的发射概率较低，由表 2 可知，其入射面和背面的发射电流相比 Si,Cu 和 W 等都小很多；背面的次级电子发射电流要高于入射面的发射电流。

3 结论

本文采用MCNP模拟了X射线辐照下多种材料的次级电子发射特性,发现辐照样品的X射线强度和焦斑大小受系统准直孔大小的影响较大;不同材料的次级电子发射能谱主要集中在低能量区间,峰值为10 keV左右,管电压和材料种类是电子能谱的主要影响因素,同时也是电子发射电流强度的主要因素。以上结论为强X射线辐照下材料的应用提供了理论基础,也为将来进一步开展实验研究和测量提供了指导。

参考文献:

- [1] 李超,庄伟,颜敏.一种抗辐照试验测试系统中RS485总线IO设计[J].太赫兹科学与电子信息学报,2017,15(2):333-337.(LI Chao,ZHUANG Wei,YAN Min. Design of a RS485 bus IO card applied in measurement system of anti-radiation experiment[J]. Journal of Terahertz Science and Electronic Information Technology, 2017,15(2):333-337.)
- [2] 何林彦,罗萍,周泉,等.一种抗辐照的光电探测芯片设计[J].太赫兹科学与电子信息学报,2019,17(3):515-518.(HE Linyan, LUO Ping,ZHOU Xiao,et al. Design of radiation hardening optical receiver chip[J]. Journal of Terahertz Science and Electronic Information Technology, 2019,17(3):515-518.)
- [3] 罗宏伟,恩云飞,王涛,等.一种新的辐射试验技术——低能X射线辐照[J].可靠性物理与失效分析技术,2004(3):56-59.(LUO Hongwei,EN Yunfei,WANG Tao,et al. A new irradiation technology—low energy X-ray radiation[J]. Electronic Product Reliability and Environment Testing, 2004(3):56-59.)
- [4] 陈盘训.X射线剂量增强环境下电子系统辐射效应和加固[J].抗核加固,2000,17(1):116-122.(CHEN Panxun. Radiation effect and reinforcement of electronic system X-ray enhancement environment[J]. Anti Nuclear Reinforcement, 2000,17(1):116-122.)
- [5] 林东生,周辉,关颖,等.DPF X射线元器件及电路辐照效应实验[C]//第九届全国核电子学与探测技术学术年会论文集.大连:原子能出版社,1998:293-296.(LIN Dongsheng,ZHOU Hui,GUAN Ying,et al. Study of DPF X-ray effects on elements and circuits[C]//Proceedings of the 9th National Conference on Nuclear Electronics & Nuclear Detection Technology. Dalian, Liaoning,China:Atomic Energy Press, 1998:293-296.)
- [6] 张强,李成榕.X射线激励下局部放电的研究进展[J].电工技术学报,2017,32(8):22-32.(ZHANG Qiang,LI Chengrong. Review on X-ray induced partial discharge[J]. Transactions of China Electrotechnical Society, 2017,32(8):22-32.)
- [7] 卢中西,于虹,徐志钮,等.X射线照射对绝缘材料聚乙烯介电常数的影响[J].科学技术与工程,2015,15(28):129-132.(LU Zhongxi,YU Hong,XU Zhiniu,et al. X-ray irradiation effects on insulating materials polyethylene dielectric constant[J]. Science Technology and Engineering, 2015,15(28):129-132.)
- [8] 刘泽坤,于虹,刘宇,等.X射线辐射对固体绝缘材料电气性能影响的研究[C]//2014年云南电力技术论坛论文集.昆明:云南科技出版社,2014.(LIU Zekun,YU Hong,LIU Yu,et al. Influences of X-ray irradiation on electrical properties of solid materials[C]//2014 Yunnan Electric Power Technology Forum. Kunming,Yunnan,China:Yunnan Science and Technology Press, 2014.)
- [9] X-5 Monte Carlo team. MCNP—a general monte carlo N-particle transport code,Version 5[R]. LA-CP-03-0245, 2003.
- [10] 邵欣,邓玉福,马跃,等.X光管的构造、原理及应用[J].沈阳师范大学学报(自然科学版),2012,30(3):354-359.(SHAO Xin, DENG Yufu,MA Yue,et al. Structure,principle and application of X-ray tube[J]. Journal of Shenyang Normal University(Natural Science), 2012,30(3):354-359.)
- [11] 复旦大学,清华大学,北京大学.原子核物理实验方法[M].北京:原子能出版社,1997.(Fudan University,Tsinghua University, Peking University. Nuclear physics and experimental methods[M]. Beijing:Atomic Energy Press, 1997.)

作者简介:

赵伟(1988-),男,博士,助理研究员,主要研究方向为粒子与物质相互作用的数值模拟与测量方法.
email:hailang921@foxmail.com.

何佳龙(1984-),男,博士,助理研究员,主要研究方向为绝缘材料及物理机制.