

爆炸物的 X 射线相干散射实验研究

郁忠强 周化十 高树琦

(中国科学院高能物理研究所 北京 100049)

摘要 采用同步辐射连续光谱的 X 射线(1.2—38.2keV),对数种爆炸物(含铝黑色炸药、黑色炸药、黑索今、纯硝酸炸药、硝酸炸药和 TNT)和非爆炸物(糖、奶粉、咖啡、纸等)进行了小角度的 X 射线散射实验,得到了上述几种爆炸物和非爆炸物的小角度相干散射谱.从爆炸物的 X 射线散射谱中可以找到他们各自的特征衍射峰作为他们的“指纹”,从而可以将爆炸物从非爆炸物中鉴别出来.

关键词 同步辐射 X 射线 相干散射 非破坏性检测技术 爆炸物

1 引言

常用的 X 射线非破坏性检测技术采用层析成像技术,其原理是基于 X 射线在物质中衰减的变化规律.这种方法可以获得被测物体的形状和密度,但是不可能区分材料的性质.在材料科学中,常采用 X 射线的衍射方法和 X 荧光方法来区分材料的性质和成分.X 射线荧光法可区分材料中的不同元素成分,而衍射法能决定材料的结晶结构.为了在 X 射线的非破坏性检测技术中同时给出某些成像技术和衍射方法给出的信息,发展了一种称为能量色散的 X 射线衍射层析技术(Energy Dispersive X-ray Diffraction Tomography, 简称为 EXDT)^[1-3],或称为相干 X 射线散射(Coherent X-ray Scattering, 简称为 CXRS)分析法.目前,这种方法已被用于某些医学、工业和另外一些 X 射线的应用研究中.最重要的一个应用是用于机场行李中爆炸物和毒品的检测.

本工作是利用同步辐射 X 射线连续光,对数种爆炸物(含铝黑色炸药、黑色炸药、黑索今、纯硝酸炸药、硝酸炸药和 TNT)和非爆炸物(糖、奶粉、咖啡、纸等)进行了小角度的 X 射线散射实验,得到了上述几种爆炸物和非爆炸物的小角度相干散射谱,从爆炸物的 X 散射谱中可以找到他们各自的特征衍射峰作为他们的“指纹”,从而可以将爆炸物从非爆炸物中鉴别出来.

2 实验方法

在中国科学院高能物理所的同步辐射装置的高压站上,采用具有连续光谱的 X 射线(1.2—38.2keV),形成一个针状束,辐照样品,在一个固定的散射角测量散射谱.束流的斑点为 $20 \times 20 \mu\text{m}^2$. 散射角 θ 由一个 0.1mm 宽的狭缝所限定,狭缝高度为 4.5mm.探测器由高纯锗(hpGe)探测器和 4096 道的多道分析器组成.如图 1 所示.

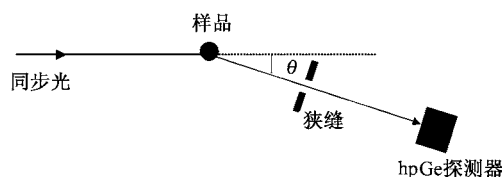


图 1 实验装置示意图

同步光能量:1.2—38.2keV,光斑大小: $20 \times 20 \mu\text{m}^2$,
狭缝: $0.1\text{mm} \times 4.5\text{mm}$,样品 - 探测器距离:19.5cm,
狭缝 - 探测器距离:13.5cm.

Bragg 公式给出了相干散射 X 射线波长 λ 、散射角 θ 和结构常数 d 之间的关系

$$2d \sin(\theta/2) = \lambda, E/hc \sin(\theta/2) = 1/2d,$$

其中 h 为普朗克常数, c 为光速, E 为散射光子的能量.由于入射光是连续的光谱,所以样品材料的不同结构常数可以得到相应的不同的衍射峰.也就是说,

散射光谱上不同的衍射峰对应了样品材料中的不同的结构常数.按照公式,如果改变散射角 θ ,同一样品的散射能谱和衍射峰值将移动.散射角增大,相应的衍射峰的能量将下降.

从衍射峰的能量 E 可以计算出相应的结构常数 d ,而衍射峰的能量展宽 ΔE 不仅反映了探测器系统的能量分辨,而且还反映了狭缝宽度和同步辐射的光斑大小引起的散射角的散开.从图 2 中看到,狭缝宽度和光斑大小引起的散射角 θ 在 θ_{\max} 和 θ_{\min} 之间,

$$\Delta\theta = \theta_{\max} - \theta_{\min}, \Delta E = hc \Delta\theta / d\theta^2.$$

在实际测量中, $\Delta\theta$ 不能被忽略.也就是说, $\Delta\theta$ 不仅影响了作用区的大小,即空间分辨,也关系到结构常数的决定和有效地鉴别不同的样品材料.

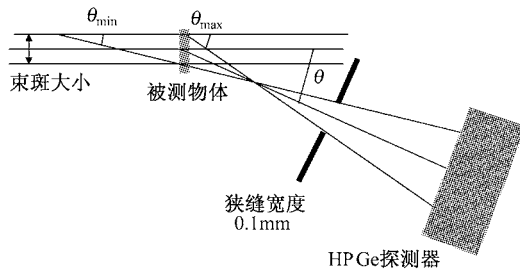


图 2 束斑大小和狭缝宽度引起散射角散开的示意图

3 实验结果

为了确认 X 射线相干散射方法的可行性和实验系统的可靠性,首先选择一个铝薄片作为样品,测量了在不同散射角下的 X 射线散射谱.图 3 给出了铝片在散射角为 4° , 7° , 10° , 14° 和 18° 时的散射谱.从图中可以清楚地区分出材料的特征 X 谱线和衍射谱线.在 4° , 7° , 10° 和 14° 的散射谱中都有 6.39keV 的 Fe $K\alpha$ 特征 X 射线和 8.60keV 的 Zn $K\alpha$ 特征 X 射线.在改变散射角时,特征峰的能量是不变的.而相干散射的衍射峰能量是由 Bragg 公式决定,它是随散射角的改变而变化的.在散射角为 10° 时,测量到一个 30.55keV 的衍射谱线,当散射角变为 14° 和 18° 时,该谱线移动到 21.89keV 和 17.01keV .按 Bragg 公式,可以计算出他们相应的晶格结构常数分别为 0.233nm , 0.232nm 和 0.233nm .说明他们属于同一个晶格结构常数,相应的晶格面为 (111).从样品铝的不同散射角得到的 X 射线散射谱可以看出整个实验系统是可靠的,在该设备上作 X 射线相干散射方法的研究是可行的.

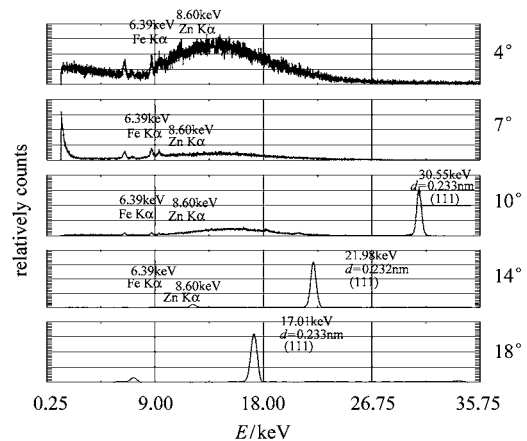


图 3 不同散射角时铝的相干散射能谱

图 4 给出了含铝黑色炸药在散射角分别为 7° , 10° 和 14° 时的散射谱.从这 3 个谱中可以看到能量不变的 6.41keV 的 Fe $K\alpha$ 特征峰和 7.46keV 的 Ni $K\alpha$ 特征峰.在散射角为 7° 时的散射谱中可以看到 15.26keV , 15.65keV , 18.00keV 和 20.35keV 4 个明显的衍射峰.前两个峰靠得很近,当散射角变为 10° 时,这两个峰合并为一个 10.83keV 的峰.另外两个峰出现在 12.63keV 和 14.36keV 处.在散射角为 10° 的谱中,新增加了 2 个衍射峰, 17.34keV 和 21.51keV .当散射角为 14° 时,散射角 10° 时的 12.63keV , 17.34keV 和 21.51keV 移到了 8.93keV , 12.38keV 和 15.40keV , 同时在后面又增加了几个衍射峰,并在 21.82keV 处出现了铝(111)的衍射峰.

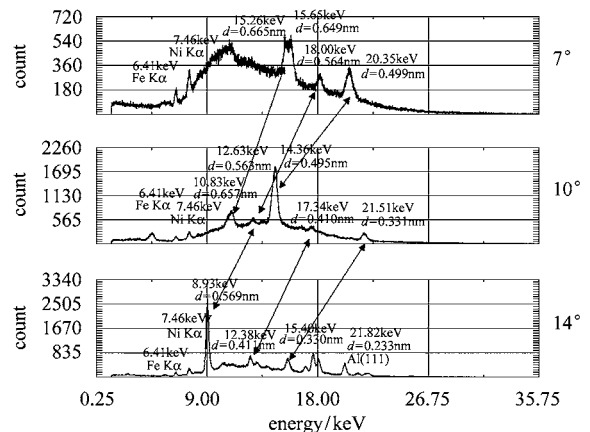


图 4 不同散射角时含铝黑色炸药的相干散射能谱

从图 4 中看出,不同散射角时可能出现不同的衍射峰,有的峰在某一散射角时特别清晰,但也有可能在另外的散射角时变得模糊,甚至无法分辨.例如

散射角 7° 时的衍射峰 20.35keV ($d = 0.499\text{nm}$) 和散射角 10° 时的衍射峰 14.36keV ($d = 0.495\text{nm}$) 很清晰,但在 14° 时已无法分辨.在实际 X 射线相干散射应用时,选择合适的散射角和相应的衍射峰十分重要.

图 5 给出的是爆炸物黑索今在散射角从 4° 到 18° 时的相干散射谱.在不同的散射角时,可以看到有不同能量的衍射峰.从图中看出,为了以特征的衍射峰作为“指纹”来鉴别黑索今的是否存在,在本工作所使用的同步辐射能区范围选择的散射角在 $8^\circ\text{--}14^\circ$ 为宜.

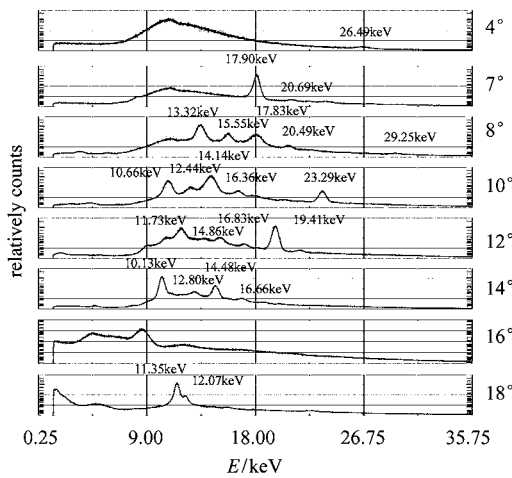


图 5 不同散射角时黑索今的相干散射能谱

选择固定的散射角 10° ,分别测量了 6 种爆炸物的散射谱,包括含铝黑色炸药、黑色炸药、黑索今、纯硝酸铵炸药、硝酸铵炸药和 TNT.图 6(a)给出了他们的散射谱.每种爆炸物都有各自的衍射峰,从中至少可以选择 2—4 个衍射峰作为鉴别他们的特征“指纹”,列于表 1 中.

表 1 散射角 10° 时爆炸物的衍射峰和结构常数

爆炸物	衍射峰能量 E/keV	结构常数 d/nm
含铝黑色炸药	10.83, 14.36, 21.51	0.657, 0.495, 0.331
黑色炸药	15.35, 18.66, 19.06, 23.73	0.463, 0.381, 0.373, 0.300
黑索今	10.63, 12.49, 14.01	0.669, 0.569, 0.508
纯硝酸铵炸药	14.66, 18.03	0.485, 0.394
硝酸铵炸药	10.20, 12.83	0.697, 0.554
TNT	10.21, 11.88, 14.27, 20.18	0.697, 0.599, 0.498, 0.352

同时,在固定散射角 10° 时,分别测量了多种非爆炸物(糖、奶粉、咖啡、水等)的散射谱,测量结果给出在图 6(b)中.这些非爆炸物材料中有的没有观察

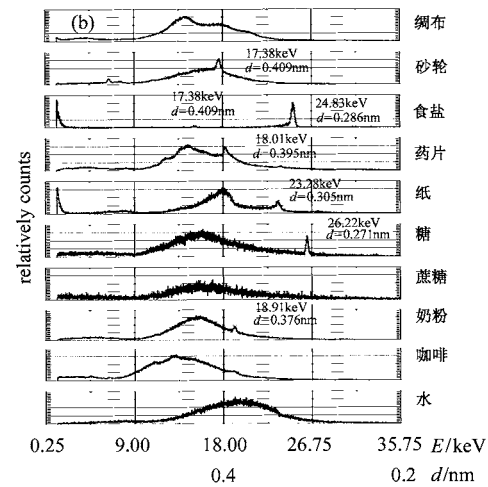
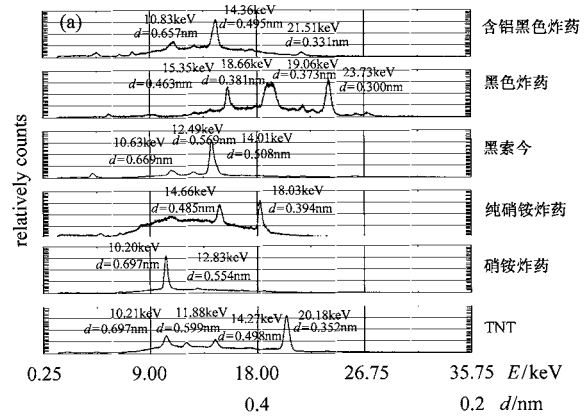


图 6 (a) 散射角为 10° 时爆炸物的相干散射能谱;
(b) 散射角为 10° 时非爆炸物的相干散射能谱.

到明显的衍射峰,有的存在衍射峰.其中观察到的衍射峰和相应的结构常数 d 列于表 2 中.

表 2 散射角 10° 时非爆炸物的衍射峰和结构常数

非爆炸物	衍射峰能量 E/keV	结构常数 d/nm
绸布	—	—
砂轮	17.38	0.409
食盐	24.83	0.286
药片	18.01	0.395
纸	23.28	0.305
糖	26.22	0.271
蔗糖	—	—
奶粉	18.91	0.376
咖啡	—	—
水	—	—

爆炸物很容易从没有衍射峰的非爆炸物中区分开来,对于有衍射峰的非爆炸物,可以通过比较他们的峰位,同样可以将爆炸物从这些非爆炸物中区分

出来.从表 1 和表 2 中看到,只有药片的衍射峰和纯硝酸铵炸药的第 2 个衍射峰相重,但后者还有另一个特征衍射峰,所以仍然很容易将该药片和纯硝酸铵炸药区分开来.

4 小结和讨论

从上述 6 种爆炸物的散射谱看到,他们都有相应的多个衍射峰可以作为识别的“指纹”.非爆炸物的散射谱中有的有衍射峰,有的没有.一般说,日常生活用品的散射谱比较简单,可以很容易和爆炸物区分开来.从原理上讲,采用小角度 X 射线相干散射的方法将爆炸物从非爆炸物中鉴别出来是可行的.

爆炸物的种类甚多,包括军用的、工业用的和自制的.同一种类的爆炸物由于制造工艺和成分的不同,他们的 X 射线散射谱也有所不同.所以必须将不同种类的爆炸物的标准样品的散射谱数据存入计算机的数据库中作为参照数据,将待测物的“指纹”

数据和数据库中的参照数据作比较,才能将爆炸物从非爆炸物中鉴别出来.

使用 X 射线能量在 0.2—38.2keV 的光源时,散射角选择在 8° — 14° 的范围有利于鉴别爆炸物.

由于低能的 X 射线在物质中的衰减系数较大,而同步辐射高能端 X 射线的强度较弱,所以只有在能量范围 10—30keV 的衍射峰比较清晰,相应的物质结构常数在 0.22—0.68nm 范围.

如果采用 160kV 的 X 光机作为 X 光源,散射角应选择在 3.0° — 5.2° 范围.观测的衍射峰大约在 20—100keV 范围.

在小角度 X 射线相干散射方法的实际应用中,选择合适的 X 光源光斑大小和合适的狭缝宽度是十分重要的.这关系到作用区的大小、衍射峰的有效鉴别和测量的速度,必须进行充分的实验研究.

感谢中国科学院高能物理研究所 BEPC 国家实验室的支持,同步辐射实验室高压组刘景和和有关实验人员的协助.感谢北京市公安局魏全生的帮助.

参考文献 (References)

- 1 Speller R D et al. SPIE, 1993, **2092**: 366—377
- 2 Jupp I D et al. IEEE Tran. On Nucl. Sci., 2000, **47**: 1987—1994
- 3 Sameer Singh, Maneesha Singh. Signal Processing, 2003, **83**: 31—55

Coherent X-Ray Scattering for Identification of Explosives

YU Zhong-Qiang ZHOU Hua-Shi GAO Shu-Qi

(Institute of High Energy Physics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China)

Abstract Coherent X-ray scattering spectra of some explosives (black powder, TNT, etc.) and some non-explosives (sugar, milk powder, coffee, paper, etc.) have been measured using polychromatic X-rays (1.2—38.2keV) on Beijing Synchrotron Radiation Facility of IHEP Beijing. The measured peak positions of X-ray diffraction spectra can be regarded as a ‘fingerprint’ of the explosives. Principally, peak positions and identification techniques of diffraction spectra can be used for the identification of explosives.

Key words synchrotron radiation, X-ray, coherent scattering, non-destructive detection technique, explosives