

用于爆炸物探测的 X 射线相干散射技术研究*

魏存峰^{1,2;1)} 郁忠强² 阎永廉² 周化十² 高树琦² 孔伟² 薛德胜^{1,2} 魏龙²

1 (兰州大学磁学与磁性材料教育部重点实验室 兰州 730000)

2 (中国科学院高能物理研究所核分析技术重点实验室 北京 100049)

摘要 建立了基于 X 光机的相干散射实验装置, 对用于爆炸物探测的 X 射线相干散射技术进行了研究. 在一个固定的角度下 (6.5°), 测量了多种常见爆炸物和非爆炸物的相干散射谱. 结果表明, 每种爆炸物都有特定的相干散射谱线, 包含了与物质化学组分相关的“指纹信息”. 使用这一方法可以将爆炸物从常见的非爆炸物中鉴别出来.

关键词 X 射线 相干散射 爆炸物探测

1 引言

近年来, 各种利用爆炸物进行恐怖活动的事件不断发生. 为了防止恐怖事件发生, 新型爆炸物探测技术的研制成为反恐工作的重要内容之一. 在爆炸物探测的 X 射线方法中, 最常用的是透视成像技术, 利用 X 射线穿过物体时的衰减规律, 得到物体的形态和密度信息, 如双能射线成像和 X 射线 CT. 但受其原理制约, 这类方法只能得到物体内的物理缺陷或密度信息, 无法判断物质的化学成分, 用于爆炸物探测无法区分密度接近的爆炸物和非爆炸物, 如 TNT 和咖啡, 从而造成很高的误报率. 而材料科学中常用的 X 射线衍射 (XRD) 技术可以得到的物质的晶体结构信息, 通过与已知的数据库对比, 进而得到物质的化学组分信息, 具有很好的物质鉴别能力. 近年来, 国际上发展了一种用 X 射线相干散射进行物质鉴别的新方法, 称为能量色散的 X 射线衍射成像技术 (EXDT)^[1] 或相干 X 射线散射 (CXRS) 分析. 该技术已在医学、工业等多个领域得到应用^[2, 3], 用于块状物体中材料的定量分析和具有位置分辨的材质分析甚至三维组分成像. 而其中最重要的应用是航空包裹中爆炸物和毒品的检测, 该技术不但可以判断包裹中是否包含爆炸物和毒品, 而且可以判断出爆炸物毒品的种类. 与其他爆炸物探测方法相比, 相干散射方法具有很低误报率^[4, 5], 具有

广阔的应用前景.

目前国内研究机构对这一技术的研究仍处于起步阶段. 中国科学院高能物理所的郁忠强等人在同步辐射装置上, 用具有连续光谱的 X 射线形成的针状束照射样品, 在小角度下用高纯锗探测器 (HPGe) 测量散射线的能量谱, 得到了多种爆炸物和非爆炸物相干散射谱^[6]. 本文介绍了基于 X 光机的 X 射线相干散射技术的方法学建立及实验装置的建立, 对多种爆炸物特征谱线的研究, 为国内发展基于该方法的爆炸物探测技术提供了理论基础和实验基础.

2 原理和实验方法

2.1 原理

通常的 XRD 包括单色光空间分辨和白光能量色散两种方法. 白光能量色散的 X 射线衍射技术也称为 X 射线相干散射技术, 用连续能量的 X 射线照射样品, 在一个固定的小角度下, 用具有能量分辨的探测器测量散射线的能量, 得到样品的相干散射谱. 相干散射实验装置结构如图 1 所示.

装置包括产生连续能量 X 射线的 X 射线源、入射和散射准直器及具有能量分辨的探测器. 射线源的焦点大小、准直器的几何结构和探测器的能量分辨决定了相干散射谱线的分辨率. 与常规的 XRD 相同, 相干

2006-03-15 收稿

* 中国科学院重点实验室择优基金和高能物理研究所知识创新项目资助

1) E-mail: weicf@ihep.ac.cn

散射满足布拉格公式：

$$d = \frac{hc}{2E \sin(\theta/2)}, \quad (1)$$

其中 d 为晶体结构常数, θ 为散射角, c 为光速, E 为衍射峰的能量.

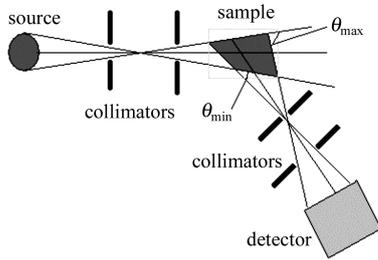


图 1 能量色散 X 射线衍射装置结构示意图

由布拉格公式可知, 当散射角固定时, 根据谱线中衍射峰的能量可以计算出相应的结构常数 d , 确定样品的晶体结构, 从而确定其化学构成.

系统的分辨率由探测器的能量分辨 $\Delta E/E$ 和系统的角分辨 $\Delta\theta/\theta$ 决定. 在小角度下 (小于 10°), 整个系统的分辨率可用下式表示:

$$\delta = ((\Delta\theta/\theta)^2 + (\Delta E/E)^2)^{1/2} \times 100\%, \quad (2)$$

其中 $\Delta\theta$ 为系统的角分散, ΔE 为探测器的能量分辨. 当准直器设计得适当, 系统的角分散只与准直器的角分散有关, 与光源大小无关, 代价是牺牲了光强.

由式 (1) 可知, 角度越小, 要保持准直器的角分辨能力, 必须相应减小准直器的角分散; 而散射角的增大会降低衍射峰的能量, 使射线的穿透能力减弱. 所以选择合适的散射角对于提高系统的分辨率是十分重要的.

2.2 实验方法

实验中采用了恒电压式 X 光机 (Ge, ISOVOLT 225 M2) 作为射线源. 该光机的靶材料为 W, 窗为 1mm 的 Be, 有效焦点大小为 3mm. 光机最高工作电压为 225kV, 实际工作电压为 140kV, 工作电流 10mA. 入射准直器由两个相距 250mm、孔直径为 1mm 高密度金属材料的准直孔组成. 样品放置在距 X 光机 1m 处的样品台上. 散射准直器由孔径大小均为 1mm 的前准直器和后准直器构成, 前准直器放置在距离样品 50mm 处, 后准直器直接与探测器连接, 与前准直器的距离为 200mm, 为了方便调节散射角, 将散射准直器及探测器固定在两个可任意平动和转动的光学平台上, 角度调整精度为 0.02° . 探测器由碲锌镉探测器、信号幅度放大器和多道分析器构成. 碲锌镉探测器

是一种新型的半导体探测器, 可以在室温下达到较好的能量分辨 (5%, 70keV). 探测器信号经幅度放大器 (2022) 放大后与多道分析器 (ORTEC TRUMP-PCI) 连接, 得到散射光的能谱.

为了观察不同爆炸物及非爆炸物相干散射谱线间的差别, 在实验中采用一个固定的角度对不同样品进行研究. 爆炸物的结构常数 d 一般在 0.2—0.7nm 之间, 根据布拉格公式, 当 X 光机电压为 140kV 时, 散射角应选择在 3° — 10° 范围内. 因此实验中选择的散射角为 6.5° . 在这一角度下, 总角分散约为 $\theta_{\max} - \theta_{\min} = 0.3^\circ$, 角分辨为 4.4%. 而当 X 射线能量为 70keV 时, 探测的能量分辨为 5%. 根据式 (2), 系统理论分辨率为 6.6%.

3 实验和讨论

3.1 标准样品的测量

为了确认 X 射线相干散射方法的可行性和实验系统参数选择的合理性, 我们用晶体结构已知的金属铝、铜等样品作为标准样品进行了验证. 当散射角为 6.5° 时, 铝样品的相干散射谱线如图 2 所示. 谱线中出现了 4 个衍射峰, 对应的能量分别在 47, 54, 77 和 90keV, 对应的晶面分别为 (111), (200), (220) 和 (311). (111) 峰的半高宽为 3.1keV, 分辨率约为 6.6%. 由于所用 X 射线管的靶材料为钨, 谱线中出现了钨的 K_α 和 K_β 线, 能量约为 59.6keV 和 67keV.

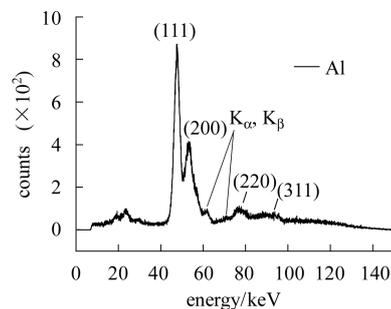


图 2 散射角为 6.5° 时铝样品的能量色散衍射谱线

相干散射谱线中包含了被测物质的晶体结构信息. 对于结构相对简单的金属等样品, 可以在计算出结构常数后, 通过与晶体结构数据库中的数据对比判断其成分.

3.2 爆炸物与常见物品的相干散射谱线

3.2.1 典型爆炸物的相干散射谱线

实验中对 TNT、8701、塑料炸药、黑索今、PYX 等 20 余种军、民用爆炸物和铝、咖啡、糖、纺织

物、有机玻璃等多种行包中常见的物质的相干散射谱线进行了研究. 每种爆炸物都有独特的、有指纹特性的相干散射谱线. 以下是实验得到的几种常见爆炸物的相干散射谱线.

图 3 所示为 5 种常见爆炸物的相干散射谱, 依次为 10—159 炸药、黑索今、奥克托今、8701 民用炸药和 TNT 药.

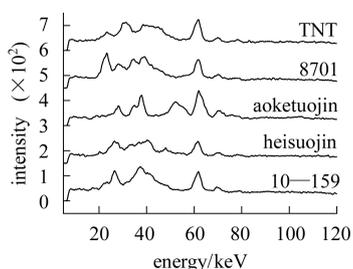


图 3 散射角 6.5° 时为几种常见爆炸物的相干散射谱

谱线具有以下特点:

- 1) 散射光子的能量范围为 10—140keV. 与 X 光机的发射的光子能量范围一致.
- 2) 不同种类爆炸物的相干散射谱线中衍射峰数目、强度和位置不同.
- 3) 所有样品的相干散射谱线中均出现了钨的特征发射峰.
- 4) 爆炸物的大多数衍射峰出现在 60keV 以下.

3.2.2 几种常见非爆炸物相干散射谱线

作为对比, 我们还对 20 多种常用物品进行了测量. 图 4 所示为其中几种常见物品的相干散射谱, 依次为玻璃、冰糖、橡皮、棉布和咖啡. 每种样品都具有特定的谱线特征; 谱线中都出现了钨的 K_α 和 K_β 线; 衍射峰的数目与爆炸物相比较少.

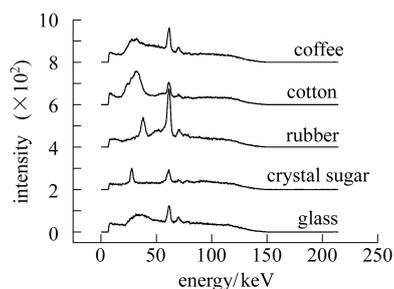


图 4 5 种非爆炸物的相干散射谱

3.2.3 同类爆炸物的对比

8701 民用炸药、R852 和聚黑-14 为几种常见的炸药, 其主要成分相同, 为黑索今 (环三亚甲基三硝胺, $C_3H_6N_6O_6$), 且含量都大于 70%, 当散射角为 6.5° 时,

其相干散射谱线如图 5 所示. 从图 5 的谱线中可以看出, 8701 民用炸药, R852 和聚黑-14 3 种爆炸物的相干散射谱线形状与黑索今的谱线较相似. 黑索今的 4 个最强衍射峰的能量分别为 22.5, 26.7, 37.5 和 40.5keV. 而在其他 3 种爆炸物的谱线中, 至少有 3 个衍射峰能量与黑索今的衍射峰能量相同, 或者在黑索今出现衍射峰的能量位置具有相对较高的计数.

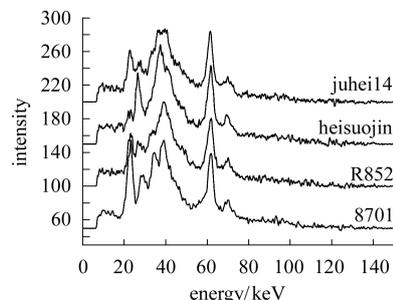


图 5 几种主要成分为黑索今的爆炸物的相干散射谱线
散射角为 6.5° . 自上而下依次为: 8701 民用炸药, R852, 黑索今, 聚黑-14.

3.3 讨论

从实验结果可以得到以下几点认识:

- 1) 对已知晶体结构的铝样品的测量结果表明, 相干散射谱线中包含了被测物的晶体结构信息.
- 2) X 射线能量为 70keV 时, 系统的分辨率为 6.6%.
- 3) 20 多种爆炸物和 20 多种非爆炸物都有独特的相干散射谱线, 具有“指纹”特征.
- 4) 所有谱线中均出现了两个非衍射峰, 可以确认为钨的特征发射谱线 K_α 和 K_β . 由于 K_α 和 K_β 的能量只与靶材料的种类有关, 不随样品种类和散射角变化, 可以用来刻度谱线的能量坐标.
- 5) 8701 民用炸药、R852、聚黑-14 和黑索今具有相似的相干散射谱线, 这与这几种爆炸物的成分接近有关.

可见, 相干散射方法可以将爆炸物与非爆炸物区分开来, 甚至可以确定爆炸物的种类.

实验结果还说明, 要真正实现该项技术的应用, 需要发展相应的模式识别方法. 这方面已开展了一些初步的工作, 将另文讨论.

常见的爆炸物如各种民用炸药及军用的炮弹添装药等, 一般是由 TNT、黑索今等和少量添加物混合而成, 这样的化合物其分子结构相对复杂, 谱线中一般存在多个衍射峰, 在分辨率较低的情况下, 相邻的衍射峰会发生交叠, 用对比结构常数的办法很难判断其化学成分. 但在相同的实验条件下, 同种爆炸物的谱

线的形状基本相同, 可以先建立各种爆炸物相干散射谱线的特征数据库, 然后将未知样品的谱线与数据库中的谱线特征对比, 用计算机自动模式识别方法实现爆炸物的自动探测.

爆炸物的种类很多, 常用的爆炸物已经超过上千种, 且不断有新的爆炸物出现. 如果要建立每一种爆炸物的相干散射数据库, 将使数据库十分庞大, 数据库的建立过程也将十分漫长. 所以, 对爆炸物的分类是十分必要的. 在生产爆炸物时, 针对不同的用途, 往往在一种化学纯的爆炸物中掺入少量其他物质形成不同性能的爆炸物. 根据这一事实, 我们将主要成分相同的爆炸物归为一个大类, 这类爆炸物的谱线的形状一般比较接近. 本文中对成分接近的几种爆炸物的研究证实了这一点. 据此, 在建立数据库时, 只需考虑几十种常见爆炸物的主要成分的相干散射谱线, 而且系

统应具有学习能力, 可以在一定的人工干预下, 自动丰富数据库. 在这种情况下, 简单的寻峰算法将无法满足低误报率的要求, 模式识别算法的设计将是影响整个系统性能的另一个重要因素.

4 结论

本文对相干散射技术在爆炸物探测方面的应用进行了研究. 建立了基于常规 X 光源的相干散射实验装置, 在 70keV 处的能量分辨为 6.6%. 通过对多种爆炸物和非爆炸物样品的研究, 得到了其具有指纹特性的相干散射谱线. X 射线相干散射方法可以区分爆炸物和非爆炸物, 甚至可以区分爆炸物之间的组分差异. X 射线相干散射方法可以作为一种可靠、实用的爆炸物探测技术, 在实际应用中发挥重要作用.

参考文献(References)

- 1 Harding G. Phys. Med. Biol., 1990, **35**: 33
- 2 Martens G. SPIE, 1993, **2092**: 387
- 3 Luggar R D. NIM-A, 1994, **353**: 650
- 4 Strecker H. SPIE, 1993, **2092**: 399
- 5 Luggar R D. Appl. Radiat. Isot., 1997, **48**(2): 215
- 6 YU Zhong-Qiang et al. HEP & NP, 2005, **29**(6): 619—622 (in Chinese)
(郁忠强等. 高能物理与核物理, 2005, **29**(6): 619—622)

Detection of Explosives by Coherent X-Ray Scatter Signature^{*}

WEI Cun-Feng^{1,2;1)} YU Zhong-Qiang² YAN Yong-Lian² ZHOU Hua-Shi²
GAO Shu-Qi² KONG Wei² XUE De-Sheng^{1,2} WEI Long²

1 (Key Laboratory for Magnetism and Magnetic Materials of the Ministry of Education,
Lanzhou University, Lanzhou 730000, China)

2 (Key Laboratory of Nuclear Analytical Techniques, Institute of High Energy Physics, CAS, Beijing 100049, China)

Abstract Coherent X-ray scatter technology or energy-dispersive X-ray diffraction has been used for many years as a method to measure the atomic planar spacings in a crystalline substance. In this paper, this method has been shown to be of particular use when the requirement is to differentiate between low Z materials where transmission techniques provide very little contrast. We applied this technique to the detection and identification of explosives. Energy-dispersive detectors were used to collect coherent scatter spectra at a small angles (6.5°). It is shown that the information from these 'signatures' can be used to determine whether an explosive sample is present or not. The geometrical configuration of the collimation and the position of the subject must be take into careful consideration when optimizing the capabilities of such a system.

Key words X-ray, coherent scatter, explosive detection

Received 15 March 2006

^{*} Supported by Preferred Fund of Key Lab of Chinese Academy of Sciences and Knowledge Innovation Program of Institute of High Energy Physics

1) E-mail: weicf@ihep.ac.cn