

УДК 543.427.4

АППАРАТНЫЕ ФУНКЦИИ ПОЛИКАПИЛЛЯРНОЙ ЛИНЗЫ И КОНФОКАЛЬНОГО РЕНТГЕНОВСКОГО МИКРОСКОПА ПРИ ПЕРЕСТРОЙКЕ ЕГО КОНФОКАЛЬНОГО ОБЪЁМА*

Д. С. Сороколетов, Я. В. Ракшун, Ф. А. Дарьин

*Институт ядерной физики им. Г. И. Будкера СО РАН,
630090, г. Новосибирск, просп. Академика Лаврентьева, 11
E-mail: rakshun@mail.ru*

Конфокальная схема эксперимента с двумя поликапиллярными линзами применяется для анализа приповерхностных слоёв образцов методом рентгенофлуоресцентного микроанализа с точностью до 10 мкм. Для увеличения пространственного разрешения необходим учёт влияния аппаратной функции конфокального рентгенооптического узла. Представляет интерес постановка экспериментов при перестраиваемой апертуре конфокального объёма. При этом в аппаратной функции может увеличиваться вклад неточности настроек. Предложен и экспериментально обоснован способ описания аппаратной функции конфокального рентгеновского микроскопа, допускающий его перестройку и учитывающий влияние ошибок угловой настройки. Он основан на применении аппроксимирующего выражения типа асимметричной «каустики гауссова пучка».

Ключевые слова: микро-РФА, рентгеновская оптика, поликапиллярные линзы, конфокальный рентгеновский микроскоп, КРМ, аппаратная функция, обратная задача.

Введение. Рентгенофлуоресцентный анализ (РФА) — неразрушающий спектральный метод исследования, основанный на изучении характеристических линий излучения химических элементов, присутствующих в образце [1, с. 25; 2, с. 5].

В экспериментах по исследованию элементного состава с микронным и субмикронным пространственным разрешением (микро-РФА) широко применяются элементы рентгеновской оптики. К примеру, использование поликапиллярных линз-концентраторов позволяет уменьшить поперечный размер области возбуждения до эффективного размера фокусного пятна линзы при увеличении потока фотонов в тысячи раз [3, 4]. Конфокальная схема эксперимента, включающая в себя две поликапиллярные линзы, применяется для анализа приповерхностных слоёв образцов с разрешением 10–50 мкм [5, 6].

В приложениях микро-РФА с пространственным разрешением до 1 мкм вместо линз-концентраторов можно устанавливать другие рентгенооптические элементы [7], такие как преломляющие рентгеновские линзы или зеркала Киркпатрика — Байеса. Как вариант можно использовать две поликапиллярные линзы в конфокальной схеме и применять математический аппарат, учитывающий влияние аппаратной функции рентгенооптического прибора на измеряемый флуоресцентный сигнал для решения обратной задачи микро-РФА — определения интенсивности флуоресценции и затем относительных концентраций.

Установка для экспериментов по микро-РФА экспериментальной станции «РФА-СИ» накопителя ВЭПП-3, называемая в работе конфокальным рентгеновским микроскопом (КРМ), использует две поликапиллярные линзы в конфокальной схеме. Конструкция уста-

*Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 14-02-00631) и Президиума СО РАН (междисциплинарный интеграционный проект № 34).

новки даёт возможность проводить исследования с перестраиваемой апертурой конфокального объёма, что имеет смысл, например, при исследовании крупнозернистых (с размером фрагментов 20–100 мкм) образцов. Путём ухудшения пространственного разрешения можно увеличить время набора для каждой позиции конфокального объёма при сканировании, что позволяет при том же полном времени эксперимента улучшить качество флуоресцентного сигнала. Это особенно важно для решения обратной задачи микро-РФА, в которой для построения эффективных алгоритмов необходимы известные и как можно меньшие величины погрешностей сигнала и аппаратной функции прибора [8, 9].

В предлагаемой работе показано, что аппаратная функция конфокальной схемы при её перестройке может описываться асимметричной зависимостью. Эта специфика предположительно объясняется неточностью настроек КРМ. В работах по применению поликапиллярных линз в рентгенофлуоресцентном микроанализе [5, 6], посвящённых вопросам достижения пространственного разрешения лучше, чем поперечный размер их фокусных пятен, данная проблема не рассматривается. Авторами предложено аналитическое выражение для описания аппаратных функций поликапиллярных линз, учитывающее их возможную асимметрию, а также представлены практические способы определения его параметров. Предполагается, что применение этого выражения позволит корректно описывать аппаратную функцию КРМ с перестройкой конфокального объёма и использовать её в количественных методиках микро-РФА.

Экспериментальная установка для микро-РФА. Все эксперименты, описанные в данной работе, были выполнены на экспериментальной станции «РФА-СИ» накопителя ВЭПП-3 Центра коллективного пользования «Сибирский центр синхротронного и терагерцового излучения». Установка, разработанная для микро-РФА, включает в себя две поликапиллярные линзы, соединённые в конфокальной схеме, и системы линейной и угловой ориентации относительно пучка синхротронного излучения (СИ) и образца (рис. 1, *a, b*). Одна линза фокусирует монохроматизированное синхротронное излучение, а другая служит для сбора флуоресцентного излучения от образца в полупроводниковый детектор. Диапазон энергии падающего излучения от 6 до 25 кэВ обусловлен характеристиками используемых поликапиллярных линз (приведены в таблице) и монохроматора на основе кристалла-«бабочки» Si(111).

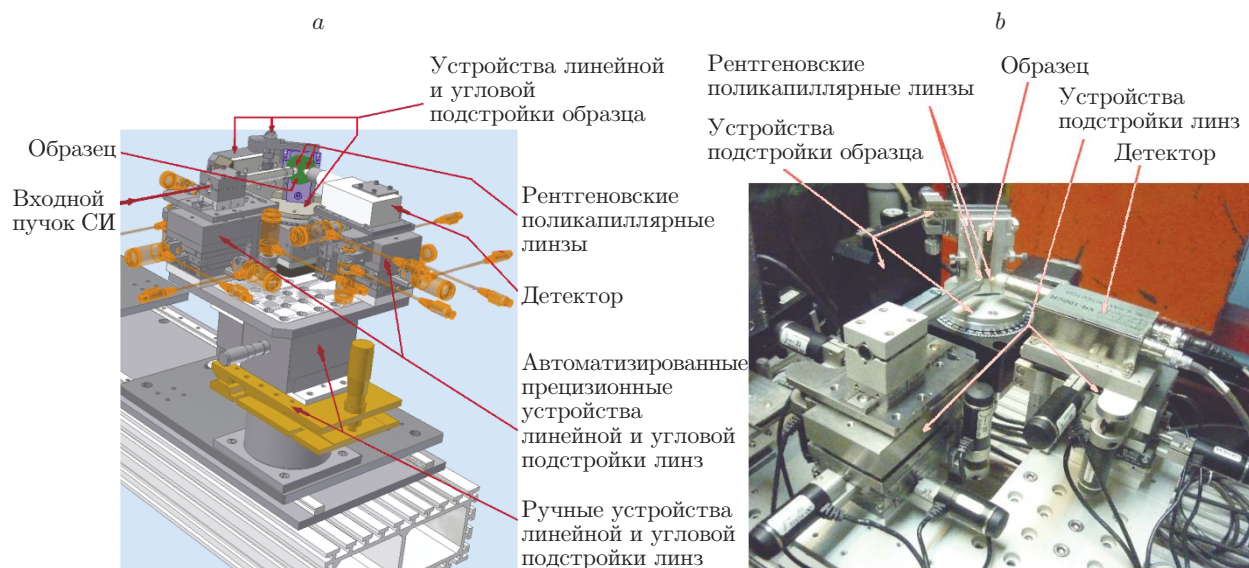


Рис. 1. Установка для микро-РФА экспериментальной станции «РФА-СИ» накопителя ВЭПП-3:
a — 3D-модель, *b* — внешний вид

Характеристики двух используемых в экспериментах поликапиллярных линз

E , кэВ	Размер фокуса, величина «полуширина на полувысоте» (ПШПВ), мкм	Коэффициент усиления	Фокусное расстояние, мм	Входная геометрическая апертура, мм	Выходная геометрическая апертура, мм
3–5	18; 19	300; 260	$5 \pm 0,1$; $5 \pm 0,1$	3,8; 3,8	2; 2,1
5–7,5	18; 19	1270; 1172			
7,5–10	16; 17	1318; 1245			
10–15	15; 16	1264; 1005			
15–20	11; 12	1064; 901			
20–25	11; 12	451; 352			

В конструкцию установки входят десять автоматизированных прецизионных пьезоэлектрических устройств, что позволяет проводить перед экспериментами автоматизированную настройку поликапиллярных линз по двум углам и трём линейным координатам, совмещая их фокусы, а также регулировать апертуру исследуемой области управлением продольными смещениями фокусирующей линзы.

Аппаратная функция конфокального рентгеновского микроскопа для случаев его идеальной и неточной настройки. В количественных методиках микро-РФА с применением рентгеновской оптики, как правило, используется способ фундаментальных параметров. В случае монохроматического первичного излучения и незначительных эффектов избирательного возбуждения и поглощения количество фотонов, регистрируемых детектором [1, с. 25, 26; 2, с. 38–42], определяется формулой

$$N_i = I_0 C_i \rho G_1 G_2 K(E, E_l) \frac{\Delta\Omega}{4\pi} \frac{dV}{\sin \Theta_0} t, \quad (1)$$

где t — время набора (с); E — энергия падающих фотонов (кэВ); E_l — энергия флуоресцентных фотонов (кэВ); dV — рассматриваемый объём (см^3); I_0 — интенсивность падающего рентгеновского излучения ($\text{см}^{-2} \cdot \text{с}^{-1} \cdot \text{кэВ}$); $C_i = C_i(X, Y, Z)$ — локальная относительная концентрация i -го элемента в пробе; $\rho = \rho(X, Y, Z)$ — локальная поверхностная плотность (г/см); $G_1 = G_1(X, Y, Z, E)$, $G_2 = G_2(X, Y, Z, E_l)$ — коэффициенты ослабления образцом падающего и вторичного излучения; $K(E, E_l)$ — коэффициент, учитывающий влияние фундаментальных параметров; $\Delta\Omega$ — телесный угол детектора; Θ_0 — угол падения возбуждающего излучения.

Использование поликапиллярной оптики в конфокальной схеме — конфокального рентгеновского микроскопа — позволяет проводить элементный анализ в области фокуса конфокальной схемы (конфокальном объёме) с характерными размерами порядка 10 мкм [5, 6]. Для получения лучшего пространственного разрешения необходим учёт аппаратной функции R_{XYZ} КРМ (двух поликапиллярных линз в конфокальной схеме), определяемой [5, 6] согласно формуле

$$\text{Sig}(x, y, z, E, E_l) = \iiint N_i(X, Y, Z, x, y, z, E, E_l) R_{XYZ}(X, Y, Z, E, E_l) dX dY dZ, \quad (2)$$

где Sig — флуоресцентный сигнал, зарегистрированный детектором (количество импульсов); x, y, z — координаты положения точки фокуса КРМ в образце (мкм); X, Y, Z — координаты положения объёмов dV из (1) (мкм). Аппаратная функция R_{XYZ} учитывает

локализацию пучка первичного излучения в объёме образца, а также чувствительность сбора флуоресцентного излучения второй линзой для каждой точки образца. Эффект гало из-за прохождения части излучения без фокусировки в линзах [3, 4] в таком рассмотрении не учитывается.

Для дальнейших рассуждений определим аппаратные функции рентгеновских линз отдельно, дополнительно к R_{XYZ} . Аналитическое выражение в виде двумерного гауссиана для аппаратной функции поликапиллярной линзы [5] было обосновано, по крайней мере, для областей вблизи конфокального объёма. Учитывая расположение рентгеновских линз в конфокальной схеме (рис. 2), запишем формулу для аппаратной функции КРМ вблизи его точки фокуса:

$$R_{XYZ} \equiv R_1 R_2,$$

$$R_1 = \frac{1}{2\pi\omega_1\omega_{1z}} e^{-\frac{(Y-Y_{10})^2}{2\omega_1^2} - \frac{(Z-Z_{10})^2}{2\omega_{1z}^2}}, \quad R_2 = \frac{1}{2\pi\omega_2\omega_{2z}} e^{-\frac{(X-X_{10})^2}{2\omega_2^2} - \frac{(Z-Z_{10})^2}{2\omega_{2z}^2}}, \quad (3)$$

где R_1, R_2 — аппаратные функции фокусирующей и собирающей линз соответственно; $\omega_1, \omega_2, \omega_{1z}, \omega_{2z}$ — параметры ширины для R_1 и R_2 (мкм); $X_{10}, Y_{10}, Z_{10}, X_{20}, Y_{20}, Z_{20}$ — координаты положения точек фокуса линз (мкм). Следуя рассуждениям из [4, 5], необходимо считать параметры ω_2, ω_{2z} и Y_{20} подчиняющимися определённым зависимостям от E_l (это же верно и для $\omega_1, \omega_{1z}, X_{10}$, если падающее на образец излучение полихроматическое).

Формула (3), как и подобные зависимости из [5, 6], может применяться при надлежащей настройке поликапиллярных линз по углам и совмещённых фокусах (т. е. $X_{10} = X_{20}$ и $Z_{10} = Z_{20}$, а также для некоторого значения энергии E_l — $Y_{10} = Y_{20}$). Используемая нами экспериментальная установка имеет возможность увеличивать апертуру конфокального объёма посредством регулируемого рассогласования фокусов линз по их продольным координатам (что соответствует $X_{10} \neq X_{20}, Y_{10} \neq Y_{20}$) с помощью автоматизированных прецизионных подвижек. Такая перестройка КРМ позволяет увеличивать время набора сигнала в каждой позиции конфокального объёма при сканировании, за счёт чего уменьшаются шумы флуоресцентного сигнала при том же полном времени эксперимента

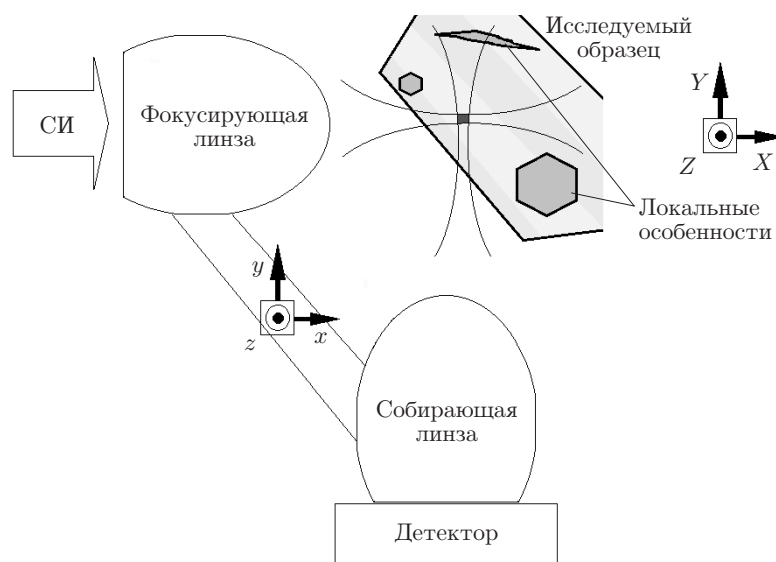


Рис. 2. Схема экспериментов микро-РФА с применением поликапиллярных линз в конфокальной схеме. Огибающие [6] показывают ширину аппаратных функций поликапиллярных линз

(которое может быть очень большим). Это важно при решении некорректной обратной задачи нахождения величины N_i по (2), поскольку параметры регуляризирующих алгоритмов, позволяющие в ряде случаев получить удовлетворительную точность и сходимость к правильному решению, определяются величинами погрешностей сигнала и аппаратной функции прибора и не могут не зависеть от них [8, 9]. Помимо этого при такой постановке задачи перестройку можно осуществлять и без переопределения аппаратной функции (перекалибровки) КРМ, прямо в процессе эксперимента. Поставим задачу экспериментального обоснования выражения (3) и определения аппаратной функции конфокальной схемы используемой установки для микро-РФА с перестроенной апертурой конфокального объёма. Для этого согласно (3) необходимо найти правильные аппаратные функции поликапиллярных линз в области их пересечения (см. рис. 2) при произвольных величинах отстроек по продольным координатам ($X_{10} - X_{20}$ и $Y_{10} - Y_{20}$).

Экспериментальное определение аппаратной функции фокусирующей поликапиллярной линзы конфокального рентгеновского микроскопа. Для определения аппаратной функции фокусирующей рентгеновской линзы проведено исследование модельного образца на установке со снятой с детектора собирающей линзой. Зависимость сигнала при различных x от поперечной координаты точки фокуса y (при $z = 0$) была получена одномерным поперечным сканированием с шагом 1 мкм вольфрамовой проволоки диаметром 10 мкм, натянутой вдоль z . Энергия возбуждающего излучения была равна 15 кэВ (заведомо выше L -краёв поглощения вольфрама [10]).

Полученный флуоресцентный сигнал должен описываться формулой (2) с $R_{XYZ} \equiv R_1$. При этом принято $K = 1$ (учитывались только форма образца и поглощение первичного и вторичного излучений в материале). Процедура определения аппаратной функции фокусирующей рентгеновской линзы выглядела следующим образом. В программе Origin 7.5 проводилась аппроксимация зависимости флуоресцентного сигнала от y подгонкой значений параметров (A, w) наиболее подходящей модельной функции — асимметричной одномерной гауссовой зависимости:

$$\text{Sig} \Big|_{R_{XYZ} \equiv R_1} (x, y, E) = \frac{A}{\text{Int}A} e^{-\frac{y^2}{2w(x, y)^2}}, \quad (4)$$

где $A = A(E)$ — максимальное значение зарегистрированного сигнала; $\text{Int}A = 0,5(2\pi)^{0,5} \times (w(x, y < 0) + w(x, y \geq 0))$ — интеграл от экспоненциального члена Sig по y ; $w(x, y) \equiv \{w_{11}(x): x < 0, y < 0; w_{12}(x): x < 0, y \geq 0; w_{13}(x): x \geq 0, y \geq 0; w_{14}(x): x \geq 0, y < 0\}$ — параметр ширины. Для проверки корректности аппроксимации необходимо анализировать графики остатков, выдаваемых утилитой. Результаты применения процедуры "lillietest" программы MATLAB [11] показывают, что явного отклонения гипотезы от нормальности распределения остатков не обнаружено почти при всех рассматриваемых значениях x . Ошибка распределена случайным образом, это подтверждается визуальным анализом графиков остатков. За величину нормы абсолютной ошибки сигнала было принято удвоенное среднеквадратическое отклонение остатков; она равна $0,02-0,05A$ при различных x .

На следующем этапе обратная задача определения R_1 согласно (2) при сглаженном сигнале и известном распределении концентрации вольфрама в образце решалась в MATLAB подбором значений параметра ω_1 для различных x . При этом расчёт проводился с пространственным разрешением 0,1 мкм (по X, Y и Z). Выяснилось, что, применяя аппаратную функцию R_1 из (3) с дополнительным условием $\omega_1 = \omega_1(X)$, нельзя корректно описать экспериментальные результаты, поскольку расчётная зависимость сигнала получается симметричной. Для выяснения характера зависимости рассмотрим принцип работы фокусирующей поликапиллярной линзы [3, с. 71–76; 4, с. 3–5]. На работу линзы помимо геометрических характеристик существенное влияние оказывают размер источника,

угловая расходимость и энергия возбуждающего излучения. При используемой входной апертуре пучка излучения диаметром 1,5 мм количество капилляров, транспортирующих рентгеновское излучение в фокус, будет составлять величину порядка 10^5 . При этом все микрокапилляры, расположенные на равном расстоянии от оси линзы, должны давать независимый и практически равный вклад в интенсивность. Основной вклад в уширение микропучка излучения в окрестности фокуса (для современных типов линз) вносит расходимость излучения от каждого капилляра в отдельности (локальная расходимость), равная $(a^2 + f_{out}^2 \beta^2)^{0,5}$, где $\beta = b\Theta_c$ — угол локальной расходимости, Θ_c — критический угол полного внешнего отражения, f_{out} — выходное фокусное расстояние. Критический угол определённым образом (обратно пропорционально) зависит от энергии транспортируемого излучения. Влиянием диаметра капилляра a обычно пренебрегают, при этом параметр $b = [1,3; 2]$ в зависимости от расходимости излучения источника. На расстояниях от линзы, значительно отличающихся от фокусного, уширение обусловлено концентрирующим принципом работы линзы (глобальной расходимостью излучения под углом α , причём $\alpha = \beta$). Пространственное распределение излучения от каждого микрокапилляра трудно поддаётся количественному описанию, если учитывать сложную зависимость отражения от угла с характерным порогом, а также возможную рассогласованность пучков капилляров и вклад неровности их отражающих поверхностей [12]. Однако вследствие большого числа по-разному задействованных в транспортировке излучения капилляров вклад всех этих факторов (в предположении их схожих значимостей) в угловое распределение фокусируемого излучения должен усредняться согласно центральной предельной теореме. Поэтому нормальный характер распределения излучения экспериментально наблюдается для поликапиллярной линзы [12]. Теперь рассмотрим ситуацию, когда юстировка линзы по углам неоптимальная. При этом капилляры, находящиеся на одном расстоянии от оси в её разных частях, будут транспортировать различные потоки излучения. Точность угловой настройки линз составляет десятые доли Θ_c , и наблюдаемая асимметрия зависимости флуоресцентного сигнала от положения фокуса (рис. 3, *a*) вполне объяснима расстройкой по углу.

Подобные рассуждения можно провести и для собирающей линзы. Поскольку настройка даёт погрешности угловой юстировки линз, которые существенно изменяют аппарат-

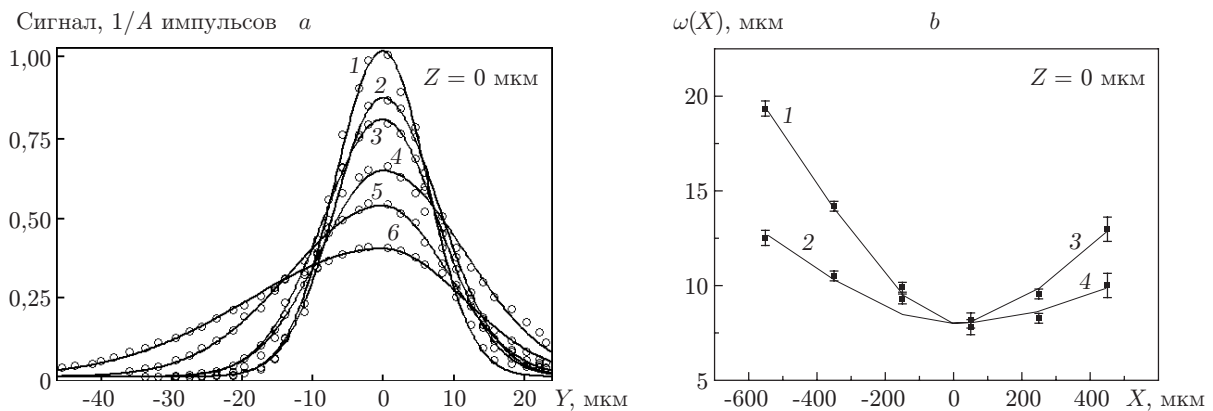


Рис. 3. Регистрируемый флуоресцентный сигнал: *a* — значения флуоресцентного сигнала (точки) и их аппроксимация гауссовыми кривыми (сплошные кривые) при одномерном сканировании вольфрамовой проволоки в различных поперечных сечениях при $x = 0$ мкм (кривая 1), 200 мкм (2), -200 мкм (3), 400 мкм (4), -400 мкм (5), -600 мкм (6); *b* — зависимость параметра $\omega_1(X)$, определённая экспериментально (точки), а также её аппроксимации (сплошные кривые) согласно выражению (5) при $X < 0, Y < 0$ (кривая 1); $X < 0, Y \geq 0$ (2); $X \geq 0, Y \geq 0$ (3); $X \geq 0, Y < 0$ (4)

ную функцию, применение (3) в случае регулирования апертуры конфокального объёма КРМ не может быть обосновано. Подберём подходящий, но по возможности простой способ описания «реальных» аппаратных функций, подобный использованному в [5, 6]. Необходимо при этом учесть, что для решения обратной задачи (2) с удовлетворительной точностью аппаратная функция должна обладать малой нормой ошибки [8, 9] (а для некоторых алгоритмов также иметь определённую степень гладкости). Мы переопределим аппаратные функции поликапиллярных линз аппроксимирующим аналитическим выражением типа «каустики гауссового пучка» [13, с. 17–18], адаптированным для асимметричного случая:

$$R_n = \frac{1}{\text{Int}_R} e^{-\frac{(Y_n - Y_{n0})^2}{2\omega_n^2} - \frac{(Z - Z_{n0})^2}{2\omega_n^2}}, \quad \omega_n(X_n, Y_n, Z, E_n) = \sqrt{\omega_{n0}^2 + \left(\frac{X_n - X_{n0}}{k_n \omega_{n0}}\right)^2}. \quad (5)$$

Здесь $n = 1$ и $n = 2$ для фокусирующей и собирающей поликапиллярных линз; $X_n = \{X: n = 1; Y: n = 2\}$; $Y_n = \{Y: n = 1; X: n = 2\}$; $\text{Int}_R = \pi(\omega_n(X, Y < 0) + \omega_n(X, Y \geq 0))\omega_{zn}$ — интеграл от экспоненциального члена R по Y и Z ; ω_{n0} — параметр ширины (мкм); $k_n = k_n(X_n, Y_n, Z, E)$ — функция, определяемая асимметрией аппаратной функции (мкм⁻¹). Имеющиеся экспериментальные данные (см. рис. 3, а) позволяют вычислить её для фокусирующей линзы только при $E = 15$ кэВ и для областей пространства $Y < 0$ и $Y \geq 0$ при $X = [-600, 400]$ и $Z = 0$. Тогда $k_1 \equiv \{k_{11}: X < 0, Y < 0; k_{12}: X < 0, Y \geq 0; k_{13}: X \geq 0, Y \geq 0; k_{14}: X \geq 0, Y < 0\}$.

Обратная задача выделения аппаратной функции (5) по (2) решалась итерационным подбором значений параметров ω_1 и X_{10} при различных x в MATLAB. Затем полученная зависимость $\omega_1(X)$ (рис. 3, б) аппроксимировалась в Origin 7.5 выражением из (5). Найденные значения параметров $X_{10} = 60$, $\omega_{10} = 5,9$, $k_{11} = 5,2$, $k_{12} = 9,6$, $k_{13} = 7,8$, $k_{14} = 14$. Результаты моделирования при различных X приведены на рис. 3, б, где изображены ошибки определения ω_1 (применяемый при этом способ рассмотрен далее). Следует отметить, что из-за однородности образца по Z зависимость $R_1(Z)$ не влияет на распределение сигнала по x и y ; в данной работе принималось $\omega_{z1} = 5,9$ и $Z_{10} = 0$, а также $Y_{10} = 0$. Как видно из рисунка, выражение (5) удовлетворительно описывает аппаратную функцию фокусирующей линзы. При этом используемая форма аппроксимации аппаратной функции, задающая её сразу для значительной области пространства, позволяет проводить количественный микро-РФА с возможностью перестройки конфокального объёма без переопределения аппаратной функции (перекалибровки) КРМ.

Экспериментальное определение аппаратной функции собирающей поликапиллярной линзы КРМ. Следующая задача состояла в нахождении аппаратной функции КРМ с перестраиваемой апертурой при известной аппаратной функции фокусирующей линзы. Для этого сначала следовало найти аппаратную функцию собирающей поликапиллярной линзы для какой-либо одной энергии флуоресцентного излучения, в нашем случае для $E_l = 8,4$ кэВ (соответствует наиболее интенсивной линии $L\alpha 1$ вольфрама [10] при энергии возбуждения $E = 15$ кэВ). Отметим, что собирающая линза устанавливалась так, что положение фокусирующей линзы с определённой ранее аппаратной функцией не должно измениться. Затем было проведено поперечное сканирование вольфрамовой проволоки с шагом 1 мкм для сечения в плоскости xy согласно схеме на рис. 2. Полученное двумерное распределение флуоресцентного сигнала (рис. 4, а) аппроксимировалось с помощью утилиты "Surface Fitting" пакета MATLAB выражением

$$\text{Sig}(x, y, z, E, E_l) = B e^{-\left(\frac{x^2}{2v^2} + \frac{y^2}{2w(x=0, y)^2}\right)}, \quad (6)$$

где B — нормировочный коэффициент; $v = v(E_l)$ — параметр ширины распределения по x . Эта зависимость с параметрами, определёнными утилитой (рис. 4, б), принималась за

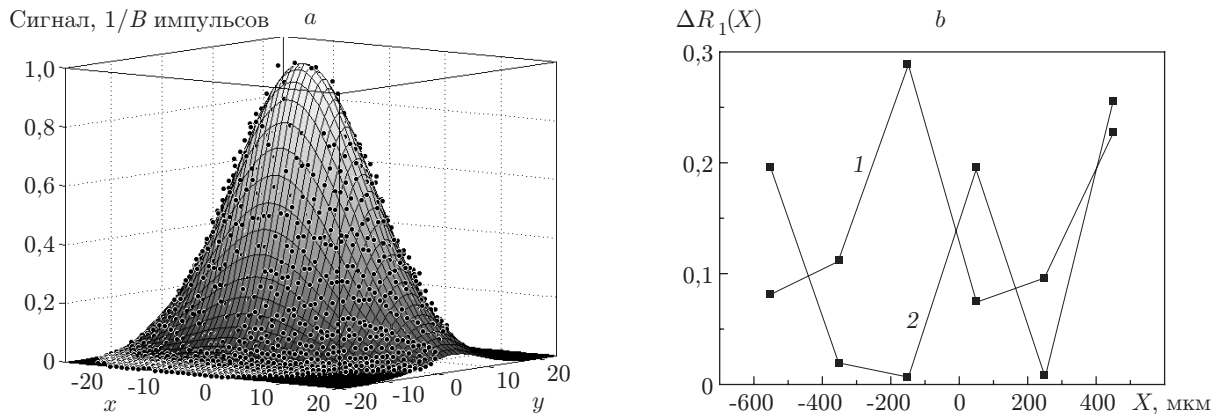


Рис. 4. Результаты обработки флуоресцентного сигнала: *a* — аппроксимация экспериментальных значений флуоресцентного сигнала при поперечном сканировании вольфрамовой проволоки (кружки) модельной функцией (6) (поверхность); *b* — приближённая оценка сверху ошибки аппаратной функции фокусирующей поликапиллярной линзы при $Y \geq 0$ (кривая 1) и $Y < 0$ (кривая 2)

наилучшую аппроксимацию экспериментального распределения флуоресцентного сигнала при имеющемся уровне погрешности сигнала. Можно считать, что значение параметра v составляет $11,4 \pm 1$ при норме ошибки сигнала $0,1V$ импульсов (принятой равной 90-й перцентили на графике остатков утилиты, поскольку тест на нормальность распределения остатков не был пройден). Большое значение ошибки обусловлено вкладом статистической погрешности, возникающей из-за малого времени набора сигнала в каждой позиции при сканировании (7 с). Для уточнения параметра v необходимо проводить эксперимент с большим временем набора сигнала для каждой позиции.

Аппаратная функция КРМ определялась выражением (3) со сглаженным вышеизложенными процедурами сигналом и переопределёнными согласно (5) R_1 и R_2 . В программе MATLAB эта обратная задача решалась итерационным подбором параметров ω_{20} , Y_{20} (при ранее вычисленном фиксированном ω_{10} , а также $\omega_{2z} = 5,9$, $Z_{20} = 0$ и $X_{20} = X_{10}$). Наиболее подходящее значение параметра ω_{20} оказалось равным $11 (\pm 3)$.

Величина параметра ω_{20} определяется критическим углом для собирающей линзы, который обратно пропорционально зависит от E_l [3, 4, 11]. Энергия флуоресцентных фотонов, испущенных атомами вольфрама, отличается от энергии возбуждающего излучения $E = 15$ кэВ, транспортируемого фокусирующей линзой. Поэтому отношение ширин фокусов должно быть $\omega_{20}/\omega_{10} \approx 1,5$ (можно оценить также из таблицы). Однако оно равно 1,95, что объясняется сложностью идеального совмещения фокусов двух линз установки по линейным координатам вследствие взаимной коррелированности вкладов действий настройки, обусловленной геометрией. Используя (5), можно посчитать, что уширение аппаратной функции собирающей линзы в $1,95/1,5 = 1,3$ соответствует расстройке этой линзы по координате Y : $Y_{20} \approx 200$ мкм.

Для определения аппаратной функции собирающей поликапиллярной линзы при прочих энергиях флуоресцентного излучения для исследуемых методом микро-РФА образцов необходимо внести поправку в величину параметра ширины ω_{20} , задаваемую критическим углом. Если энергии флуоресцентного излучения достаточно близки, то вследствие имеющего место быть при этом небольшого (до 100 мкм) изменения эффективного смещения Y_{20} изменение асимметрии аппаратной функции собирающей линзы существенного влияния оказывать не должно. Для точного описания поведения аппаратной функции КРМ в этой области значений Y необходимо проводить более детальное исследование. Анализи-

руя экспериментальные результаты [14, 15], можно сделать вывод, что при отстройках фокуса на большие продольные расстояния основной вклад в его расходимость (а значит, и в ширину фокусируемого микропучка — величину ПШПВ) вносит линейная зависимость от критического угла полного внешнего отражения. Однако в зависимости ПШПВ от смещения фокусного пятна при его отстройках на меньшие расстояния (100–250 мкм) наблюдалась характерная аномалия в виде перегиба [16], что не было учтено в (5). Возможно, этим объясняется относительно большое значение ошибки аппроксимации выражением (5) аппаратной функции фокусирующей линзы при $x = -200$ мкм (см. рис. 3, *b* и 4, *b*).

Оценка сверху погрешностей параметров и аппаратных функций в предлагаемой работе проводилась по формулам

$$\Delta p = C_1 C_2 \Delta \text{Sig}_{\text{отн}}(x); \quad \Delta R_{\text{отн}}(X) = C_2 \Delta \text{Sig}_{\text{отн}}(x), \quad (7)$$

где Δp — погрешность параметра ширины (w, v, ω_1, ω_2) какой-либо гауссовой зависимости (мкм); $\Delta R_{\text{отн}}(X)$ — ошибка аппаратной функции R , делённая на максимальное значение R при данном X ; $\Delta \text{Sig}_{\text{отн}}(x)$ — ошибка флуоресцентного сигнала $\text{Sig}(x)$, делённая на максимальное значение Sig при данном x ; C_1 — обратная величина максимальной производной Sig по y ; $C_2 = \{1: p = w, v; 3: p = w_1; 9: p = \omega_2\}$ — корректирующий коэффициент. В рассматриваемых случаях $C_1 < 10$, а C_2 устанавливался с учётом того, что случайная ошибка во флуоресцентном (интегральном) сигнале меньше погрешности аппаратной функции приблизительно на $N_p^{0,5}$ из-за сглаживания (N_p — количество позиций при сканировании, размещённых на эффективном сечении источника). Если помимо этого в $\Delta \omega_1$ внести слагаемое, характеризующее ошибку аппроксимации (внесённая систематическая ошибка), то можно приближённо оценить полную ошибку аппаратной функции фокусирующей поликапиллярной линзы ($\Delta R_{1\text{отн}}(X)$ на рис. 4, *b*). Для аппаратной функции КРМ гарантировать применяемым способом можно только ошибку величиной ещё в 6 раз больше. Как видно, при имеющемся уровне погрешностей сигнала ошибка аппаратной функции слишком велика для решения обратной задачи микро-РФА каким-либо регуляризирующим алгоритмом [8, 9] с удовлетворительной точностью (этот вывод можно было сделать уже на этапе определения параметра ω_{20} , для которого оценённая погрешность оказалась больше ошибки величины v при том, что из-за влияния образца должно быть $v > \omega_{20}$). Что же касается описания аппаратной функции по (3), то в данном случае при $|x| \geq 400$ только величина $\Delta \text{Sig}_{\text{отн}}(x)$ составляет более 20 %.

Заключение. Ряд экспериментов по исследованию пространственной зависимости флуоресцентного сигнала фокусирующей линзы КРМ был проведён на установке для микро-РФА станции «РФА-СИ» накопителя ВЭПП-3. Анализ экспериментальных результатов показал, что аппаратная функция фокусирующей поликапиллярной линзы имеет характерную асимметричную зависимость от поперечной координаты при смещении пробного образца от фокусного расстояния. Это можно объяснить влиянием ошибок настройки КРМ — неточной юстировкой поликапиллярных линз по углам.

В данной работе предложено аппроксимирующее выражение (5) для описания аппаратных функций поликапиллярных линз КРМ в обратной задаче микро-РФА (2) в случаях перестройки апертуры конфокального объёма. Также представлены практические способы для определения параметров этого выражения. С их помощью были найдены параметры аппаратной функции КРМ используемой установки и оценены ошибки моделирования. Применяемая форма описания даёт возможность проводить перестройку КРМ без переопределения аппаратной функции (без перекалибровки).

На основании полученных результатов сделаем вывод о том, что предложенный подход может быть использован для описания аппаратной функции КРМ с относительной точностью в десятки процентов. Такая невысокая точность обуславливается большими

ошибками моделирования, в которых, скорее всего, преобладает случайная составляющая, объясняемая условиями проведённых экспериментов. Поэтому имеет смысл осуществлять более детальное исследование аппаратных функций поликапиллярных линз КРМ одно- и двумерным сканированием пробного образца с большим временем набора данных в каждой позиции, а также с меньшим шагом сканирования по координате x (согласно рис. 2).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Синхротронное** излучение в геохимии: Сб. науч. тр. /Под ред. Г. Н. Аношина, Г. Н. Кулипанова. Новосибирск: Наука, 1989. 152 с.
2. **Бахтиаров А. В.** Рентгеноспектральный флуоресцентный анализ в геологии и геохимии. Л.: Недра, 1985. 144 с.
3. **Schiels P. J., Gibson D. M., Gibson W. M. et al.** Overview of polycapillary X-ray optics // Powder Diffraction. 2002. **17**, N 2. P. 70–80.
4. **MacDonald C. A.** Focusing polycapillary optics and their applications // X-Ray Opt. and Instrum. 2010. Article ID 867049. DOI: 10.1155/2010/867049.
5. **Mantouvalou I., Malzer W., Kanngießber B.** Quantification for 3D micro X-ray fluorescence // Spectrochimica Acta. Pt. B. 2012. **77**. P. 9–18.
6. **Malzer W.** 3D micro X-ray fluorescence analysis // The Rigaku Journ. 2006. **23**, N 1. P. 40–47.
7. **Snigireva I., Snigirev A.** Coherent high energy X-ray optics for imaging, diffraction and spectroscopy // AIP Conf. Proc. 2000. **507**, N 76. P. 76–82.
8. **Ягола А. Г.** Некорректные задачи с априорной информацией // Сибирские электронные математические известия. 2010. **7**. С. 343–361.
9. **Морозов В. А.** Алгоритмические основы методов решения некорректно поставленных задач // Вычислительные методы и программирование. 2003. **4**. С. 130–141.
10. **X-ray Data Booklet.** URL: http://xdb.lbl.gov/Section1/Periodic_Table/W_Web_data.htm (дата обращения: 16.06.2014).
11. **MathWork Documentation.** URL: <http://www.mathworks.com/help/stats/lillietest.html> (дата обращения: 16.06.2014).
12. **MacDonald C. A., Gibson W. M.** Applications and advances in polycapillary optics // X-Ray Spectrometry. 2003. **32**, N 3. P. 258–268.
13. **Климков Ю. М.** Прикладная лазерная оптика. М.: Машиностроение, 1985. 128 с.
14. **Романов А. Ю.** Уменьшение полной расходимости рентгеновских поликапиллярных микропучков // Письма в ЖТФ. 2008. **34**, № 18. С. 27–32.
15. **Sun T., Liu Z., Li Yu. et al.** Fine structures of divergence of polycapillary X-ray optics // Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B. 2011. **269**, N 23. P. 2758–2761.
16. **Attaelmanan A., Voglis P., Rindby A. et al.** Improved capillary optics applied to microbeam X-ray fluorescence: Resolution and sensitivity // Rev. Sci. Instrum. 1995. **66**, N 1. P. 24–27.

Поступила в редакцию 6 июня 2014 г.