

УДК 543.427.4

НЕГАУССОВЫЙ ХАРАКТЕР АППАРАТНОЙ ФУНКЦИИ ПОЛИКАПИЛЛЯРНОЙ ЛИНЗЫ ПРИ ПРОДОЛЬНОЙ РАСФОКУСИРОВКЕ

© Д. С. Сороколетов¹, Я. В. Ракшун¹, Ф. А. Дарьин¹, А. А. Гогин²

¹Институт ядерной физики им. Г. И. Будкера СО РАН,
630090, г. Новосибирск, просп. Академика Лаврентьева, 11

²Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»,
123098, Москва, пл. Академика Курчатова, 1
E-mail: D.S.Srkv@yandex.ru

Предпринята попытка точного количественного описания и обобщения характера пространственного распределения аппаратной функции (АФ) для различных случаев качества юстировки поликапиллярной рентгеновской линзы по угловым и поперечным координатам. Проведена серия экспериментальных работ по определению аппаратной функции линзы в областях, соответствующих значительным отстройкам от области её фокуса в продольном направлении. В процессе анализа полученных результатов предложено две аппроксимирующие модели, которые потенциально могут с удовлетворительной точностью аппроксимировать АФ для большинства характерных случаев настройки линзы. На примере детального анализа результатов трёх серий экспериментов по определению АФ в обширной области пространства, соответствующих различным случаям юстировки поликапиллярной линзы, показано, что предложенные модели универсальны и с высокой точностью согласовываются с экспериментальным распределением АФ.

Ключевые слова: рентгеновская оптика, поликапиллярная линза, управляемая перестройка конфокального объёма, аппаратная функция, аппроксимация, функция экстремума.

DOI: 10.15372/AUT20220108

Введение. Поликапиллярная линза относится к классу рентгеновской оптики, принцип работы которой заключается в фокусировке высокоэнергетического (диапазон энергий от единиц до 30–40 кэВ) излучения при незначительном уменьшении потока в выходную область, существенно меньшую в поперечном размере, чем размер входного пучка, посредством процесса многократного внешнего отражения [1, 2]. Минимальный поперечный размер фокусного пятна при этом составляет от 10 до 20 мкм [2–4] в зависимости от энергии проходящих фотонов (если рассматривать только современные распространённые типы линз, исключая устаревшие и специализированные короткофокусные с уменьшенной пропускной способностью с размером фокусного пятна в сотни мкм [1] и единицы мкм соответственно). Поликапиллярные линзы эффективно используются в большом количестве современных практических приложений, относящихся, например, к развитию метода рентгеновского флуоресцентного микроанализа [1–4].

Аппаратная функция (АФ) рентгеновской поликапиллярной линзы в области фокуса по двум поперечным направлениям (относительно продольной оси линзы) с высокой точностью описывается симметричными распределениями Гаусса [3, 4]. Пространственное распределение АФ по двум поперечным координатам можно получить с помощью экспериментальной процедуры сканирования проволоки [5] или процедуры сканирования кромки ножа.

В перспективе при дальнейшем развитии рентгеновских методик, основанных на использовании поликапиллярной оптики, может потребоваться знание распределения АФ с

приемлемой точностью по значительно большему пространству, чем область, непосредственно прилегающая к фокусу. В частности, это может относиться к областям, расположенным в значительном отдалении от фокусного пятна по продольному направлению (вдоль продольной оси линзы). Например, это может оказаться полезным в экспериментах, проводимых с использованием метода микроРФА-СИ по схеме «контролируемой перестройки конфокального объёма» [5, 6]. Способ, альтернативный детальному измерению АФ по довольно обширной области пространства, представляющий практический интерес, каждый раз после юстировки линзы по угловым и поперечным координатам заключается в использовании эффективной (обосновывающей потребность в существенно меньшем количестве требуемых измерений) и в то же время достаточно точной аппроксимирующей модели. Эта модель должна обладать свойством предсказания с приемлемой точностью значений АФ во всех промежуточных точках, расположенных между позициями для её измерения. Кроме того, ожидается, что при своей универсальности (пригодности для описания АФ с приемлемой точностью для большинства случаев удовлетворительной юстировки линзы) модель должна иметь ограниченное число параметров. При этом предполагается, что эти параметры должны подбираться каждый раз после перенастройки линзы по угловым и поперечным координатам.

Первая попытка аналитического описания аппаратной функции поликапиллярной линзы вне области фокуса при отстройках по её продольной оси предпринята в [5], где была обозначена проблематика и отмечено, что асимметрию наблюдаемой АФ при различных величинах отстройки вдоль продольной оси линзы с довольно высокой точностью (до ошибки, обусловленной аппаратными шумами стохастической природы) описывают две независимые гауссовы функции. Было предложено универсальное аналитическое выражение для параметров ширины левого и правого гауссианов в зависимости от величины отстройки вдоль продольной оси линзы, которое описывало реальное распределение АФ с приемлемой точностью.

Тем не менее данное аналитическое выражение, предназначенное (в перспективе) для аппроксимации АФ в обширной области пространства, имеет ряд недостатков, ограничивающих его применение на практике. В частности, оно предполагает подбор в качестве независимых свободных параметров средних положений левой и правой гауссовых зависимостей с последующей «сшивкой» их в месте перехода друг в друга. В [5] не была проведена работа по определению правил, по которым изменяются эти параметры. Кроме того, упомянутая работа была проведена для ограниченного диапазона отстроек вдоль продольной оси линзы — примерно 600 мкм в обе стороны.

Цель данной работы заключается в поиске аналитических выражений, которые наиболее точно описывали бы распределение АФ поликапиллярной линзы по пространству, принимая во внимание все её экспериментально наблюдаемые характерные особенности (включая асимметрию). При этом дополнительно должны быть соблюдены три требования. Во-первых, рассматриваемая область пространства должна быть не менее 1 мм по обе стороны от фокуса вдоль продольной оси линзы. Во-вторых, предлагаемая форма описания не должна приводить к неоднозначности трактовки используемых параметров, подобной вышеупомянутой. В-третьих, данные выражения должны быть применимы после каждой проведённой процедуры юстировки линзы по угловым и поперечным координатам (при этом допускается (при необходимости) введение в выражения одного или двух дополнительных подгоночных параметров, значения которых могут быть подобраны индивидуально для каждого отдельного случая юстировки).

Основные типы пространственного распределения аппаратной функции, наблюдаемые экспериментально. Качественное описание. Аппаратная функция поликапиллярной линзы в поперечных координатах может быть описана с приемлемой

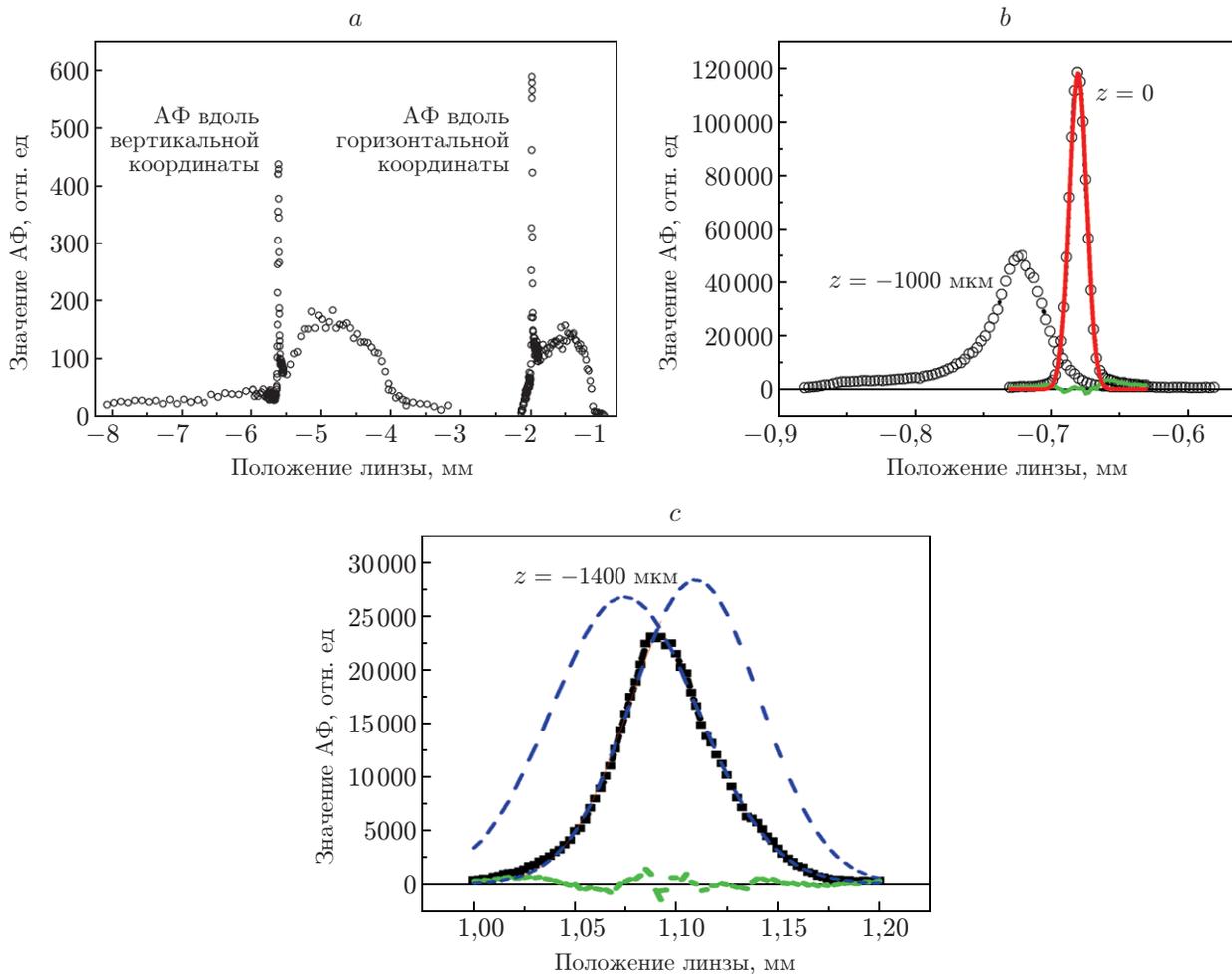


Рис. 1. Распределения значений аппаратных функций поликапиллярной линзы в поперечном направлении при различных величинах продольной отстройки z и их аппроксимация различными моделями: неудовлетворительного (a), плохого, но приемлемого (b), хорошего (c) качества. Обозначения: графики с кружками и квадратами — распределения АФ, полученные экспериментально; сплошные и штриховые — аппроксимирующие кривые; пунктирные — графики остатков приведены вблизи оси абсцисс

точностью симметричными гауссовыми зависимостями [2–4] далеко не во всех возможных случаях. В [5] сделано предположение, что любые случаи, в которых распределение АФ в значительной мере носит какой-либо альтернативный характер, скорее всего, объясняются определённой спецификой работы линзы, настроенной по угловым координатам ненадлежащим образом (это возникает из-за комплексного характера самого процесса юстировки [7, 8], в который вовлечены сразу четыре взаимовлияющие координаты (две поперечные и две угловые), накладываемого на ограничения в точности используемых моторизованных подвижек). Все случаи, отличающиеся качеством проведённой юстировки, условно можно разделить на три характерных класса. Во-первых, это ситуации, в которых итоговое положение линзы по углам далеко от оптимального и многократное внешнее отражение почти не работает должным образом, в результате чего линза даёт большой фон в виде очень широкого одностороннего артефакта на форме АФ (рис. 1, a). Этот предельный случай, в котором нельзя работать с линзой по её назначению, тем не

менее демонстрирует, как мы полагаем, генезис характера пространственного распределения АФ и возникающих при этом артефактов, качественно похожих на те, что возникают в других случаях. Во-вторых, это случай плохого, но допустимого качества проведённой настройки по углу. Он отличается наличием такого же одностороннего бокового артефакта, но существенно меньшего по величине (от единиц до 20 %) и ширине (в эксперименте она наблюдалась равной примерно от половины до двух эффективных ширин основного пика АФ). Данный артефакт согласно наблюдениям возникает только при значениях отстройки по продольной координате более 600 мкм (рис. 1, *b*). В-третьих, это случай качественно проведённой настройки (рис. 1, *c*). Его, в свою очередь, можно подразделить на два типа, которые также различаются качеством юстировки. Однако в отличие от трёх основных классов попадание в какой-либо из них, скорее всего, непосредственно не зависит от усилий лица, проводящего настройку линзы, поскольку чувствительность её процедуры (к сопутствующим изменениям сигнала флуоресценции от пробного образца или ножа) уже не позволяет намеренно провести более точную настройку, необходимую для этого. В первом, наихудшем, из этих двух случаев с ростом отстройки линзы по продольной координате в 300 мкм и более проявляется вклад асимметрии, о чём упоминалось в [5]. Во втором, наилучшем, из всех возможных случаев этого вклада нет и АФ носит вид радиально-симметричного гауссиана при любой величине отстройки линзы по продольной координате. Согласно нашим наблюдениям в лучшем варианте из всего набора проведённых ранее случаев юстировки удалось получить симметрию АФ только один раз и лишь по одной из поперечных координат. В подавляющем большинстве остальных случаев, скорее, имел место первый вариант удовлетворительной настройки линзы.

Перспективные модели аппроксимации для аналитического описания аппаратной функции поликапиллярной линзы. На первый взгляд, распределение аппаратной функции поликапиллярной линзы в двух поперечных направлениях при относительно больших (600 мкм и более) отстройках по продольной координате (вдоль оси линзы) при хорошем качестве настройки её угловых координат с удовлетворительной точностью можно описать асимметричными гауссовыми функциями (рис. 1, *c*). В [5] предпринята попытка количественного описания АФ с приемлемой точностью с предложением аналитического выражения в виде асимметричного распределения Гаусса. Данный способ описания показал хорошие результаты, однако он имел ряд свободных параметров, детальный анализ изменения которых не попал в область рассмотрения.

В процессе поиска более подходящих моделей было опробовано применение некоторых выражений, используемых при анализе пиков в спектроскопии (пик Лоренца, логистический пик, пик экстремума) [9]. Приемлемые результаты показала только модель с использованием выражения пика экстремума:

$$\text{SF}_{\text{filteredByExtremePeak}} = y_0 + A e^{-\varepsilon^{-z} - z + 1}; \quad z = k_{\text{dir}} \frac{x - x_0}{w}, \quad k_{\text{dir}} = \pm 1, \quad (1)$$

$$\text{SF}_{\text{filteredByExtreme12my}} = y_0 + A(k_l e^{k_{\text{sgn}} z_l^{n_l}} + k_r e^{-k_{\text{sgn}} z_r^{n_r}}),$$

$$z_l = \frac{|x - x_0|}{w_l}, \quad z_r = \frac{|x - x_0|}{w_r}, \quad k_{\text{sgn}} = \frac{x - x_0}{|x - x_0|}, \quad k_l = \frac{1 - k_{\text{sgn}}}{2}, \quad k_r = \frac{1 + k_{\text{sgn}}}{2}. \quad (2)$$

В процессе анализа результатов применения этой модели было решено модифицировать данное выражение, предложив формулу (2) для возможности проведения аппроксимации с потенциально большей точностью. Принимая во внимание существование члена экспоненты в виде другой экспоненты в оригинальном выражении (1), предположено, что

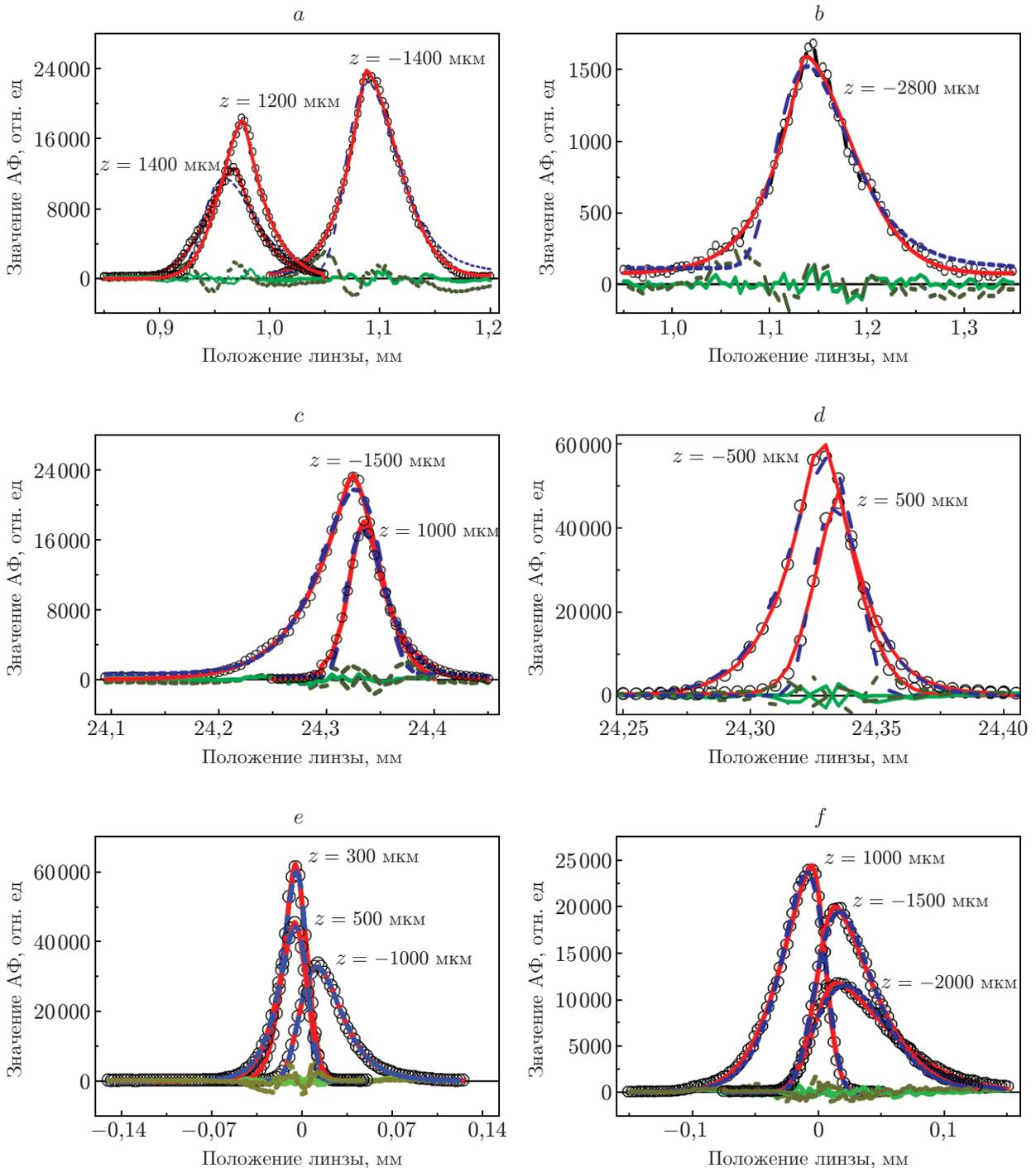


Рис. 2. Аппаратная функция, полученная при различных величинах отстройки по продольной координате z в различных случаях хорошего типа юстировки фокусирующей поликапиллярной линзы (*a*, *b*; *c*, *d*; *e*, *f*) и результаты применения к ним моделей аппроксимации на основе выражения пика экстремума в оригинальном виде и в модифицированной форме. Обозначения: графики с кружками — распределения АФ, полученные экспериментально; сплошные и штриховые — аппроксимирующие кривые; пунктирные — остатки вблизи оси абсцисс

наблюдаемое поведение АФ может хорошо объясняться правилом, основанным на существовании в первой экспоненте какого-либо показателя со значением дробной величины. Предварительный анализ показал, что параметры n_r и n_l следует выбирать заранее до подбора остальных параметров и затем считать их значения фиксированными, заданными индивидуально для каждого отдельного случая юстировки.

Результаты и обсуждение. Две модели аппроксимации, предложенные в рамках поиска способа аналитического описания с повышенной точностью формы аппаратной функции поликапиллярной линзы при больших отстройках от фокусного расстояния вдоль продольной оси линзы, были опробованы на примере их применения к результатам трёх различных серий экспериментального определения АФ. Каждая из этих серий проводилась после своей индивидуальной процедуры юстировки для различных величин отстроек линзы по продольной координате.

Результаты, которые получены с помощью модели на основе выражения пика экстремума, модифицированного вышеописанным способом, во всех случаях показали существенно более высокую точность аппроксимации, чем использование для этой цели модели на основе оригинального выражения [9] пика экстремума (рис. 2). Разброс остатков в первом случае был меньше и заметно ближе к распределению, симметричному относительно нуля, чем во втором случае. Более того, в отдельных случаях этот разброс, будучи проверенным одним из статистических тестов на нормальность распределения [10], не опроверг его с достаточной степенью значимости.

Предложено проводить первоначальный подбор фиксированных параметров n_l и n_r (общих для всех величин отстроек, соответствующих каждому рассматриваемому случаю юстировки) в модели на основе модифицированного выражения таким образом, чтобы модель с оставшимися параметрами, подобранными в процессе аппроксимации, описывала АФ с приемлемой точностью. Для результатов, показанных на рис. 2, *a—d*, были выбраны фиксированные параметры $n_l = 1,15$ и $n_r = 1,75$ для случаев отстройки линзы при $z < 0$, а также $n_l = 1,75$ и $n_r = 1,15$ для случаев отстройки линзы при $z > 0$. Для результатов, показанных на рис. 2, *e, f*, были выбраны фиксированные параметры $n_l = 2$ и $n_r = 1,5$ для случаев отстройки линзы при $z < 0$, а также $n_l = 1,5$ и $n_r = 2$ для случаев отстройки линзы при $z > 0$.

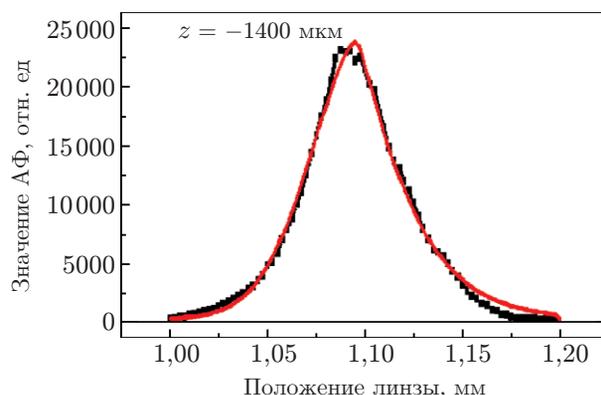


Рис. 3. Аппроксимация экспериментального распределения аппаратной функции, показанного на рис. 1, *c* и 2, *a*, модифицированным выражением пика экстремума с намеренно неправильным выбором параметров n_l и n_r для демонстрации важности корректного первоначального подбора данных параметров (кривая с квадратами — экспериментальное распределение АФ, сплошная — аппроксимирующая кривая)

Следует также подчеркнуть, несмотря на то что первоначальный выбор фиксированных параметров определенным образом влияет на результат последующего подбора остальных (свободных) параметров, неправильный выбор первых может сделать последнее довольно затруднительным. Для примера был рассмотрен случай аппроксимации аппаратной функции моделью с неправильной предварительной настройкой (рис. 3), в которой намеренно поменяли местами оптимально подобранные значения фиксированных параметров. Другими словами, значения n_l и n_r в данном случае взяты правильными (как на соответствующем модельном распределении на рис. 2, *a*), однако после этого их намеренно поменяли местами в выражении (2).

Заключение. В данной работе показано, что модель аппроксимации на основе выражения пика экстремума как в своём первоначальном виде, так и в модифицированной форме перспективна для аналитического описания аппаратной функции рентгеновской поликапиллярной линзы, предварительно юстированной по угловым координатам с применением автоматизированных пьезоподвижек и ряда алгоритмических подходов, в областях пространства, отстоящих от 300 до 2000 мкм от фокусного пятна вдоль оси линзы. Предложенная модель при необходимости может быть использована в перспективных количественных методиках, направленных на исследование объектов различной природы и основанных на точном учёте потока рентгеновского излучения, фокусируемого или собираемого поликапиллярной линзой.

Благодарности. Эксперименты по определению аппаратной функции были проведены на станции «Локальный и сканирующий РФА-СИ» научной установки ВЭПП-3М (уникальный идентификатор УНУ RFMEFI62119X0022) в исследовательском пользовательском центре «Сибирский центр синхротронного и терагерцового излучения (СЦСТИ)» и на станции «РТ-МТ» научной установки ВЭПП-3М «Курчатовский специализированный источник синхротронного излучения (КИСИ-Курчатов)» (уникальный идентификатор УНУ RFMEFI61914X0002) в исследовательском пользовательском центре «Курчатовский центр синхротронного и нейтронного исследований».

Финансирование. Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 19-05-50046).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Schilders 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.
2. **MacDonald C. A.** Focusing polycapillary optics and their applications // X-Ray Optics and Instrumentation (Online). 2010 (10). DOI: 10.1155/2010/867049.
3. **Mantouvalou I., Malzer W., Kanngißer B.** Quantification for 3D micro X-ray fluorescence // Spectrochimica Acta. Pt B. 2012. **77**. P. 9–18.
4. **Sun T., Liu Z., Li Yu. et al.** Fine structures of divergence of polycapillary X-ray optics // Nucl. Instrum. and Meth. Phys. Res. B. 2011. **269**, N 23. P. 2758–2761.
5. **Сороколетов Д. С., Ракшун Я. В., Дарьин Ф. А.** Аппаратные функции поликапиллярной линзы и конфокального рентгеновского микроскопа при перестройке его конфокального объёма // Автометрия. 2015. **51**, № 3. С. 94–103.
6. **Darin F. A., Sorokoletov D. S., Rakshun Ya. V. et al.** On the search and localization of platinum-group microelements in samples of the chromite horizon in the Bushveld complex // Journ. Surface Investigation: X-Ray, Synchrotron and Neutron Techniques. 2018. **12**. P. 123–127.
7. **Darin F. A., Sorokoletov D. S., Rakshun Ya. V.** Automated adjustment of confocal X-Ray microscope // Proc. of the 23rd Intern. Congress on X-ray Optics and Microanalysis. New-York, USA, Sept. 14–18, 2015. P. 7.

8. **Дарьин А. В., Ракшун Я. В., Сороколетов Д. С.** Система юстировки поликапиллярной оптики на станции РФА СИ // Кн. тез. XX нац. конф. по использованию Синхротронного Излучения «СИ-2014». Новосибирск, 7–10 июля, 2014. С. 80.
9. **Origin[®] 7.5 Documentation.** URL: http://www.originlab.com/pdfs/16_CurveFitting.pdf (дата обращения: 04.10.2021).
10. **MathWork Matlab[®] Documentation.** URL: <http://www.mathworks.com/help/stats/lillietest.html> (дата обращения: 04.10.2021).

Поступила в редакцию 08.11.2021

После доработки 28.12.2021

Принята к публикации 28.12.2021
