

На правах рукописи

Романов Алексей Викторович

ВОЗБУЖДЕНИЕ РЕНТГЕНОВСКОЙ ФЛУОРЕСЦЕНЦИИ  
В КОНДЕНСИРОВАННЫХ СРЕДАХ ПОЛИХРОМАТИЧЕСКИМ  
РЕНТГЕНОВСКИМ ИЗЛУЧЕНИЕМ

Специальность 01.04.07 — физика конденсированного состояния

Автореферат  
диссертации на соискание ученой степени  
кандидата физико-математических наук

Москва — 2007



## Общая характеристика работы

**Актуальность работы.** Элементарные процессы взаимодействия монохроматического рентгеновского излучения с веществом (фотоэлектрическое поглощение, упругое и неупругое рассеяние, излучательная и безызлучательная релаксация возбужденного атома) достаточно хорошо изучены. Однако, в реальном эксперименте для возбуждения различного рода вторичных сигналов, используемых для исследования конденсированного вещества, часто используется смешанное полихроматическое (характеристическое и тормозное) рентгеновское излучение. Особое место среди вторичных процессов, возбуждаемых в твердом теле жестким электромагнитным излучением, занимает рентгеновская флуоресценция, так как её сигнал содержит информацию об элементном составе вещества.

Метод рентгенофлуоресцентного анализа (РФА) занимает особое место среди многочисленных вариантов рентгеноспектральных методов анализа конденсированного вещества. Высокая экспрессность метода, возможность определения в одном эксперименте элементов от В до Рu, широкий диапазон определяемых содержаний: от  $10^{-4}\%$  до 100% массовых — способствовали распространению этого метода как в научных исследованиях, так и в аналитическом контроле промышленного производства. Научной основой этого метода является физика взаимодействия жесткого рентгеновского излучения (энергия кванта 5–100 кэВ) с конденсированными средами; возникающая в результате взаимодействия рентгеновская флуоресценция (характеристическое излучение атомов образца) выступает в качестве информативного сигнала. Определение состава вещества в РФА проводится с использованием градуировочных характеристик (зависимости между содержанием элемента и интенсивностью флуоресцентного сигнала), построенных на этапе разработки методики анализа. При этом основной проблемой количественного РФА является необходимость использования для построения градуировочной характеристики образцов известного, причем близкого к изучаемому веществу, состава — адекватных образцов сравнения (АОС). В массовых анализах определенного класса объектов, для которых разработана соответствующая методика и имеются АОС, время РФА составляет 1 – 5 минут. В случае, когда возникает задача количественного анализа единичного образца, разработка методики такого анализа может занять от нескольких дней до нескольких недель. Поскольку при анализе вещества неизвестного состава изготовление комплекта АОС неоправданно, то особое значение приобретают способы расчётной коррекции различий в составе исследуемого образца и АОС.

Основная сложность анализа единичных образцов заключается в выборе условий проведения эксперимента с учётом реальных характеристик

спектрометра и корректном учёте матричных эффектов (поглощение первичного и флуоресцентного излучений, вторичное возбуждения флуоресценции определяемых элементов флуоресцентным излучением присутствующих в исследуемом образце других элементов и т.п.), учёте возможных наложений спектральных линий, выборе режима работы рентгеновской трубки и пр. Обычно этот этап работы выполняется высококвалифицированными специалистами, при этом время, требуемое на его осуществление, во многом определяется их предшествующим опытом.

Таким образом, для развития методов количественного РФА требуется детальное описание процесса генерации флуоресцентного сигнала. Несмотря на изученность физической природы отдельных составляющих, количественное описание процесса формирования вторичного рентгеновского излучения в целом, для случая полихроматического возбуждения, отсутствует до настоящего времени.

**Целью работы** является изучение процесса генерации сигнала рентгеновской флуоресценции, возбуждаемой полихроматическим рентгеновским излучением в конденсированном веществе; развитие и разработка количественных методов экспериментального изучения свойств единичных образцов на основе анализа рентгенофлуоресцентного сигнала. Для достижения этой цели были решены следующие задачи:

- детально изучен вклад фундаментальных физических процессов взаимодействия полихроматического излучения с конденсированным веществом, определены процессы, дающие основной вклад в величину сигнала вторичного спектра;
- в результате учёта факторов, дающих основной вклад во вторичный спектр, разработана модель процесса возбуждения рентгеновской флуоресценции в конденсированных средах полихроматическим излучением и определены способы учёта влияния измерительной аппаратуры на регистрируемый рентгеновский спектр;
- выполнена программная реализация разработанной модели регистрируемого рентгеновского спектра в виде лабораторной информационной системы (ЛИС), позволяющей оптимизировать этап планирования эксперимента в РФА единичных образцов произвольного состава;
- произведена экспериментальная проверка построенной модели и изучены возможности применения разработанной ЛИС для рентгенофлуоресцентного анализа.

**Методы исследований**, реализованные для достижения цели работы, основаны на развитии существующих, адекватных рассматриваемым физическим явлениям и процессам, математических моделей, связанных с процессом возбуждения рентгеновской флуоресценции в конденсированных средах. Для анализа количественных соотношений использованы математические методы решения поставленных задач, опирающиеся на теорию аппроксимации, численное и аналитическое интегрирование. Основой экспериментальных исследований явились методы количественного РФА конденсированных сред.

**В качестве объектов исследований** были выбраны растворы и сплавы, содержащие элементы периодической системы, начиная с  $^{12}\text{Mg}$  и заканчивая  $^{92}\text{U}$ , в концентрациях от  $10^{-4}\%$  до 100% массовых.

**Достоверность полученных результатов** обеспечена детальным рассмотрением физических процессов, связанных с возбуждением сигнала рентгеновской флуоресценции в веществах произвольного состава, что позволило на базе уже имеющихся представлений создать оригинальную математическую модель, реализующую новые подходы к описанию процесса формирования флуоресцентного сигнала. Во многом достоверность полученных результатов обеспечивается хорошим согласием между результатами расчётов и проведёнными экспериментальными исследованиями, а также сравнением с литературными данными.

*Работа является частью исследований, проведённых в рамках грантов Российского фонда фундаментальных исследований и правительства Калужской области (№ 04-03-97210 и № 07-02-96406).*

#### **Научная новизна работы:**

- разработана модель генерации рентгеновской флуоресценции в конденсированном веществе смешанным (характеристическим и тормозным) полихроматическим излучением. В модели учтены основные факторы, определяющие спектр вторичного излучения;
- проведена оценка влияния условий проведения эксперимента на характер регистрируемого спектра. Предложены методы учёта этих факторов, которые позволили количественно описать регистрируемый спектр с точностью, позволяющей использовать построенную модель для разработки методики определения элементного состава единичных образцов в количественном рентгенофлуоресцентном анализе.

### **Практическая значимость работы:**

- разработанная ЛИС позволяет формализовать процедуру определения условий проведения эксперимента в РФА вещества и, тем самым, существенно сократить время разработки методик определения количественного состава единичных образцов на этапе планирования эксперимента;
- использование разработанной ЛИС позволяет сократить время проведения измерений в РФА за счёт оптимизации размеров измеряемых областей спектра и сокращения количества производимых измерений.

### **На защиту выносятся:**

- количественная модель формирования вторичных рентгеновских спектров при полихроматическом возбуждении конденсированных сред электромагнитным излучением с энергиями кванта 5–100 кэВ;
- принципы построения лабораторной информационной системы для описания процесса возбуждения рентгеновской флуоресценции в конденсированных средах;
- способы выбора условий проведения рентгенофлуоресцентного анализа единичных образцов с использованием разработанной лабораторной информационной системы.

**Апробация работы.** Основные результаты диссертационной работы были доложены на следующих научных конференциях: XXXIV и XXXV международных конференциях по физике взаимодействия заряженных частиц с кристаллами (г. Москва, 2004 и 2005 гг.); V национальной конференции по применению рентгеновского, синхротронного излучений, нейтронов и электронов для исследования наноматериалов и наносистем (г. Москва, 2005 г.); International Conference „Analytical Chemistry and Chemical Analysis“ (г. Киев, 2005 г.); 2-ой международной конференции по физике электронных материалов (г. Калуга, 2005 г.); 2-ой Всероссийской конференции „Аналитические приборы“ (г. Санкт-Петербург, 2005 г.); 7-ом Всероссийском семинаре „Проблемы теоретической и прикладной электронной и ионной оптики“ (г. Москва, 2005 г.); XIV Российском симпозиуме по растровой электронной микроскопии и аналитическим методам исследования твердых тел (г. Черноголовка, 2005 г.); 13-ой Всероссийской межвузовской научно-технической конференции студентов и аспирантов „Микроэлектроника и информатика — 2006“ (г. Зеленоград, 2006 г.); международной научной конференции „Современные проблемы

математики, механики и информатики“ (г. Тула, 2006 г.); 2-ой международной конференции „Датчики, приборы и системы“ (г. Ялта, 2006 г.); International Congress on Analytical Sciences (г. Москва, 2006 г.); XVI и XVII международных совещаниях „Радиационная физика твердого тела“ (г. Севастополь, 2006 и 2007 гг.); XVIII Mendeleev Congress on General and Applied Chemistry (г. Москва, 2007 г.); VI национальной конференции по применению рентгеновского, синхротронного излучений, нейтронов и электронов для исследования материалов (г. Москва, 2007 г.).

**Публикации.** По материалам диссертации опубликовано 19 работ. Основные результаты диссертационной работы изложены в 11 статьях, из них 3 статьи опубликованы в журналах из перечня ВАК Минобрнауки РФ.

**Личный вклад автора** заключается в анализе и выборе моделей и эмпирических зависимостей для описания основных этапов формирования сигнала рентгеновской флуоресценции конденсированных сред и распространении моделей на случай полихроматического возбуждения; в создании алгоритмов для количественного описания процесса формирования вторичных рентгеновских спектров при полихроматическом возбуждении конденсированных сред электромагнитным излучением с энергиями кванта 5–100 кэВ в виде программы и программных модулей; в проведении необходимых экспериментальных исследований.

**Структура и объем работы.** Диссертация состоит из введения, четырех глав, выводов и списка цитируемой литературы из 119 наименований. Работа изложена на 125 страницах машинописного текста, содержит 2 таблицы и 28 рисунков.

## Основное содержание работы

**Во введении** обоснована актуальность темы, научная новизна и практическая значимость полученных результатов, сформулированы основные защищаемые положения.

**Первая глава диссертации** носит обзорный характер. В ней рассмотрены основные представления о физической природе взаимодействия рентгеновского излучения с веществом и существующие модели описания этих процессов, а также особенности использования метода РФА для определения количественного состава веществ в конденсированном состоянии.

В этой главе рассмотрены фундаментальные процессы взаимодействия

рентгеновского излучения (РИ) с веществом (поглощение и рассеяние РИ атомами), а также процессы, происходящие при переходе атома из возбуждённого состояния в стационарное (излучательная и безызлучательная релаксация). Показано, что в случае монохроматического возбуждения рентгеновской флуоресценции в твердом теле процесс формирования наблюдаемых в эксперименте спектров подчиняется четким закономерностям. При этом важнейшие величины (интенсивности аналитических линий и составляющих фона) могут быть успешно описаны количественно.

На практике чаще всего используют источники рентгеновского излучения, испускающие полихроматическое излучение — тормозное и характеристическое РИ. Наблюдаемая спектральная зависимость вторичного излучения существенным образом определяется спектральным составом возбуждающего РИ. С целью учёта этого были рассмотрены основные источники первичного РИ, используемые для возбуждения сигнала рентгеновской флуоресценции. Особое внимание уделено рассмотрению спектрального распределения интенсивности излучения рентгеновских трубок, как наиболее распространённых источников первичного РИ в рентгенофлуоресцентном методе анализа вещества.

Большинство работ, посвященных разработке методик проведения количественного РФА веществ, направлено на решение задач подготовки образцов к измерениям, разработке методов учета влияния состава на интенсивность флуоресцентного излучения, при этом работы, посвященные определению оптимальных условий проведения эксперимента, практически отсутствуют.

Из проведённого анализа литературных источников следует, что для случая возбуждения флуоресцентного сигнала смешанным полихроматическим РИ до настоящего момента отсутствует полное количественное описание процесса в целом; нет методик и алгоритмов, позволяющих учесть все основные физические закономерности взаимодействия РИ с конденсированным веществом и построить модель регистрируемого спектра излучения с учетом особенностей измерительной аппаратуры. На основе проведённого анализа современного состояния проблемы сформулированы конкретные задачи исследования.

**Во второй главе диссертации** приведены результаты исследования вклада отдельных фундаментальных процессов в формирование спектра рентгеновской флуоресценции конденсированного вещества.

Общее количество факторов, оказывающих влияние на спектр флуоресцентного излучения, достигает нескольких десятков. В результате проведённой оценки их вклада в результирующий спектр были определены

основные факторы, позволяющие построить количественную модель формирования спектра флуоресцентного излучения с точностью, достаточной для использования модели на этапе разработки методики измерений.

В построенной модели учтены следующие факторы: а) спектральное распределение интенсивности первичного РИ рентгеновской трубки; б) когерентное и некогерентное рассеяние первичного и вторичного излучений в веществе образца; в) фотоэлектрическое поглощение первичного излучения; г) эффект возбуждения флуоресцентного излучения определяемого элемента характеристическим РИ других элементов, присутствующих в образце.

Для количественного описания спектрального состава возбуждающего излучения предложен способ расчёта, базирующийся на моделях Крамерса и Косслета-Грина. В исходном виде эти модели позволяют получить соответствие лишь по порядку величины. Поэтому, в предлагаемый способ введены теоретические поправки и эмпирические соотношения, позволяющие учесть дополнительно следующие эффекты: поглощение тормозного и характеристического излучения при распространении его в аноде трубки; обратное рассеяние электронов в аноде; поглощение РИ в окне трубки и отклонение результатов, получаемых в модели Крамерса от экспериментальных в длинноволновой области спектра тормозного РИ трубки.

На рис. 1 представлен рассчитанный с помощью предложенного способа спектр РИ трубки с Rh анодом. Согласие с экспериментом от (5 – 7) % относительных в длинноволновой области и вблизи краёв поглощения и менее 5 % в коротковолновой области рентгеновского спектра.

Осуществлён выбор способов количественного описания элементарных процессов, существенных для генерации флуоресцентного излучения, таких как распределение массовых коэффициентов поглощения (рис. 2) и рассеяния излучения (рис. 3), выход флуоресценции, величины скачков поглощения, вероятность ионизации оболочки и возбуждения характеристической линии. Произведено сравнение результатов, рассчитанных с использованием выбранных ашпроксимационных выражений, с табличными данными. Показано, что в большинстве случаев погрешность расчёта не превышает 1–2% (рис. 4). Предложенные способы распространены на случаи возбуждения полихроматическим рентгеновским излучением.

Рассмотрен процесс формирования сигнала рентгеновской флуоресценции и способ расчета интенсивностей линий ХРИ, возбуждённых полихроматическим РИ. Вклад в интенсивность  $l$ -линии  $q$ -оболочки флуоресцентного излучения, возбужденной монохроматическим излучением энергии  $E$ , с учетом ослабления первичного и флуоресцентного излучения для толсто-

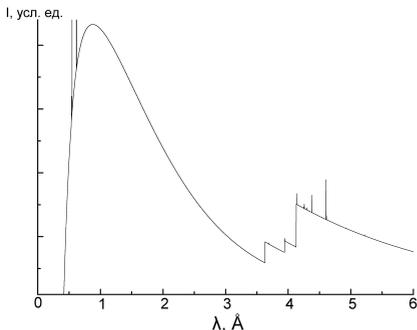


Рис. 1. Рассчитанный спектр первичного излучения для Rh трубки, напряжение на аноде 30 кВ

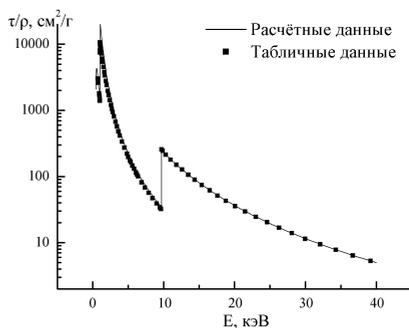


Рис. 2. Массовые коэффициенты фотоэлектрического поглощения для Zn. Сравнение результатов моделирования с табличными данными

го образца<sup>1</sup> вычисляли следующим образом:

$$\begin{cases} I = k_g I_0 \Delta_q \omega_q p_l \left( \frac{\tau \cdot \sin \varphi \cdot \sin \psi}{\mu_E \sin \psi + \mu_{E'}} \right), & E \geq E_q, \\ I = 0, & E < E_q. \end{cases} \quad (1)$$

Здесь  $k_g$  — коэффициент, учитывающий параметры спектрометра;  $I_0$  — интенсивность первичного излучения;  $\Delta_q$  — доля поглощенного излучения, идущего на возбуждение  $q$ -оболочки;  $p_l$  — доля флуоресценции, приходящаяся на  $l$ -линию;  $\varphi$  и  $\psi$  — углы падения первичного и выхода флуоресцентного излучения соответственно;  $\mu_E$  и  $\mu_{E'}$  — коэффициенты ослабления первичного и флуоресцентного излучений;  $\omega_q$ ,  $E_q$  — выход флуоресценции и энергия края поглощения  $q$ -оболочки соответственно. Параметры  $\varphi$  и  $\psi$  определены конструкцией, коэффициент  $k_g$  определяют экспериментально для конкретного спектрометра;  $I_0$ ,  $\Delta_q$ ,  $\mu_E$ ,  $\mu_{E'}$ ,  $\tau$  — функции энергии;  $p_l$ ,  $\omega_q$ ,  $E_q$  — атомные константы.

Основная доля флуоресцентного излучения возбуждается тормозным излучением. Оно также играет определяющую роль в формировании фонового сигнала. Линии характеристического излучения материала анода рентгеновской трубки оказывают меньшее влияние на интенсивность ана-

<sup>1</sup>Образец, для которого выполняется условие:  $\exp(-\mu x) < 0,01$ , где  $\mu$  — массовый коэффициент ослабления излучения в образце,  $x$  — толщина образца,  $\rho$  — плотность вещества

литического сигнала, однако в результате когерентного и некогерентного рассеяния в материале вещества формируют дополнительные пики в регистрируемом спектре. Для вычисления интенсивности линии, возбужденной тормозным спектром, производилось суммирование значений интенсивностей, рассчитанных по формуле (1), по всему тормозному спектру.

Основной составляющей фонового излучения является рассеянное в пробе первичное РИ. При некогерентном (комптоновском) рассеянии длина волны первичного фотона увеличивается на величину, пропорциональную  $\Delta\lambda$ , значение коэффициента пропорциональности определяется углом рассеяния. Так как угол рассеяния может принимать значения от 0 до  $\pi$ , то длины волн рассеянного излучения  $\lambda$  находятся в диапазоне  $[\lambda_0; \lambda_0 + 2h/(m_e c)]$ , где  $h$  — постоянная Планка,  $m_e$  — масса электрона,  $c$  — скорость света в вакууме. Для учёта некогерентного рассеяния тормозного излучения увеличение длины волны  $\Delta\lambda$  предлагается принять равной:

$$\Delta\lambda = \frac{h}{m_e c}. \quad (2)$$

Тогда формулу для расчета некогерентной составляющей фона можно записать в следующем виде:

$$I_{inc} = k_{g1} \cdot I_0 \cdot \frac{\sigma_{incE} \sin \varphi \cdot \sin \psi}{\mu_E \sin \varphi + \mu_{E'} \sin \psi}, \quad (3)$$

где  $k_{g1}$  — коэффициент, учитывающий параметры спектрометра,  $\sigma_{incE}$  — коэффициент некогерентного рассеяния для энергии  $E$  (соответствующей длине волны  $\lambda$ ),  $E'$  — энергия, соответствующая длине волны  $\lambda + \Delta\lambda$ . Составляющая фона, полученная в результате когерентного рассеяния первичного излучения рассчитывается по формуле аналогичной (3), с тем отличием, что энергия первичного фотона не меняется, т. е.  $E' = E$ .

Характеристическое излучение рентгеновской трубки (рис. 1), будучи рассеянным, добавляет в регистрируемый спектр дополнительные линии. Однако, при расчёте некогерентно рассеянной линии ХРИ допущение (2) не применимо, поэтому вычисления необходимо производить по всем углам рассеяния: от 0 до  $\pi$  — в результате чего полуширина линий увеличивается.

Коэффициенты пропорциональности  $k_g$  и  $k_{g1}$  в формулах (1), (3) содержат в себе информацию о параметрах спектрометра, таких как облучаемая площадь поверхности вещества, телесный угол отбора первичного и вторичного излучений и т.д. Эти коэффициенты находились экспериментально для каждого конкретного спектрометра.

При переходе к многокомпонентным образцам использован закон аддитивности для массовых коэффициентов ослабления: эффективный ко-

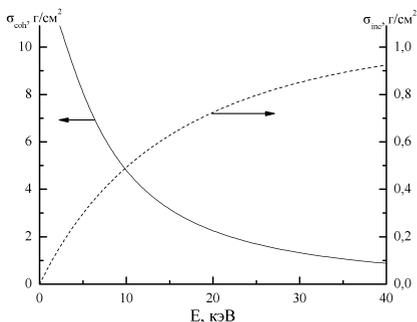


Рис. 3. Массовые коэффициенты когерентного и некогерентного рассеяния для Zn. Результаты моделирования

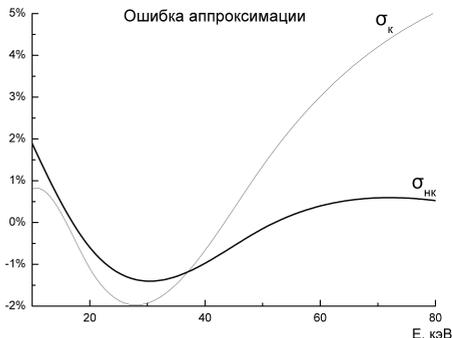


Рис. 4. Погрешность расчета коэффициентов ослабления для когерентного и некогерентного рассеяния для Ba.  $\delta = (\sigma_{calc} - \sigma_{litr}) / \sigma_{litr}$

эффицент ослабления определяется для данной длины волны как средневзвешенное значение, весовыми коэффициентами служат массовые доли соответствующего компонента в образце.

В случае многокомпонентного вещества существенный вклад в интенсивность линий флуоресцентного излучения могут вносить вторичные эффекты, наиболее значимыми из которых являются эффекты избирательного возбуждения и поглощения РИ. Их вклад в интенсивность линий ХРИ может достигать десятков процентов. Вклад остальных видов вторичных и третичных эффектов редко превосходит 1–2% и в построенной модели не учитывается.

**Третья глава диссертации** посвящена разработке лабораторной информационной системы для моделирования вторичных рентгеновских спектров при полихроматическом рентгеновском возбуждении.

При реализации математической модели рентгеновской флуоресценции вещества произвольного состава были учтены следующие факторы:

- а) элементный состав образца (информация о содержании каждого элемента), плотность вещества;
- б) условия измерений: углы падения и выхода первичного излучения рентгеновской трубки, угол падения первичного излучения на вещество, угол выхода флуоресцентного излучения;
- в) параметры конкретного спектрометра: вид аппаратной функции, параметры кристалла-анализатора, схема работы спектрометра.

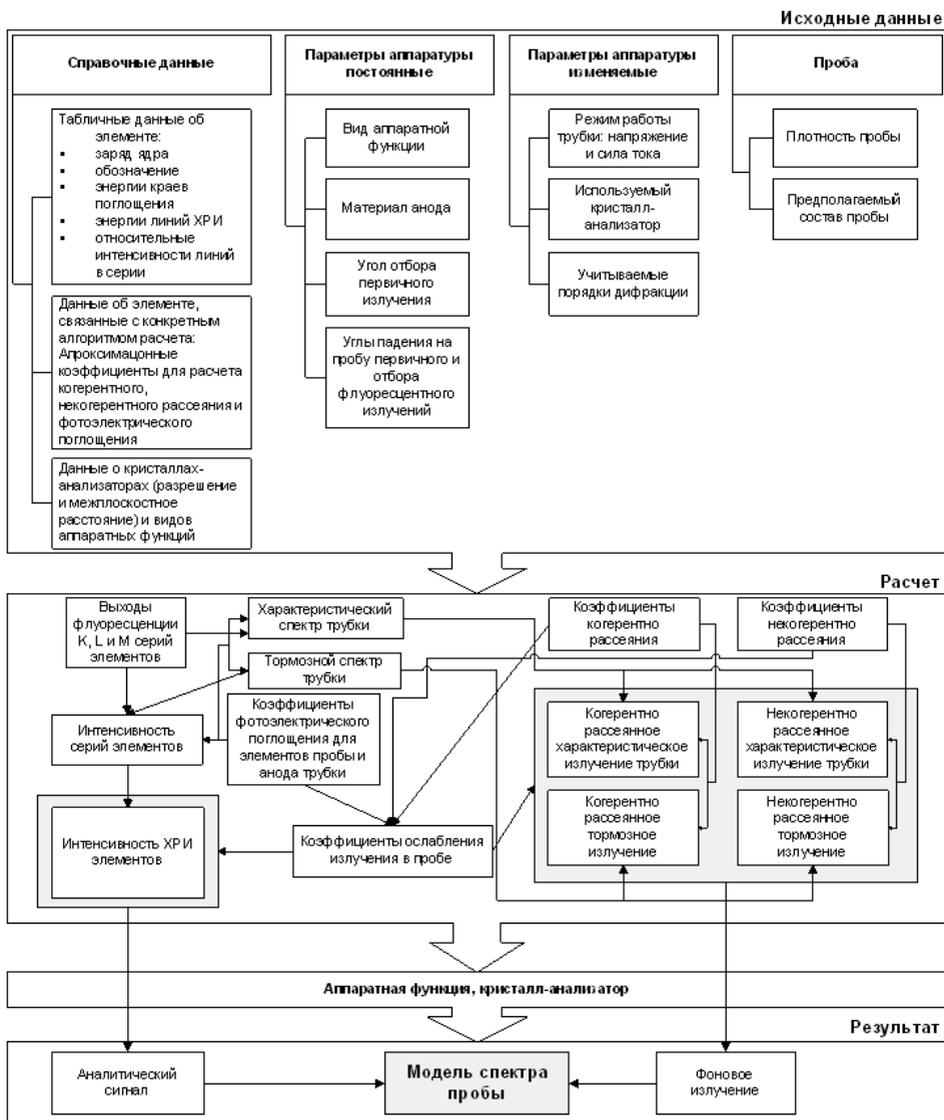


Рис. 5. Блок-схема работы ЛИС для рентгенофлуоресцентного анализа

На основе предложенной модели формирования сигнала вторичной рентгеновской флуоресценции была разработана информационная модель взаимодействия рентгеновского излучения с веществом и построена схема ЛИС (рис. 5), для которой были определены:

- исходные данные и способы их хранения и определения: база данных, содержащая необходимую справочную информацию, структуры представления данных в компьютере;
- этапы и порядок расчёта частных моделей;
- однократно и многократно используемые данные.

Разработаны алгоритмы для расчета компонентов частных моделей. Определен порядок и способы объединения частных моделей в единую модель формирования сигнала вторичного РИ.

ЛИС разработана с учетом принципов, позволяющих оптимально использовать вычислительные ресурсы ЭВМ.

Учёт влияния условий измерений и особенностей измерительной аппаратуры на регистрируемый спектр проведён следующим образом. Так как естественная ширина линий характеристического излучения составляет от десятых долей до единиц электрон-вольта, а разрешение серийных приборов в области К-линий элементов составляет обычно 10 - 20 эВ, наблюдаемый контур характеристических линий практически представляет собой аппаратную функцию спектрометра. Для описания профилей линий характеристического рентгеновского излучения были выбраны наиболее часто используемые в практике спектроскопии аппроксимирующие функции: а) функция Гаусса ; б) функция Лоренца; в) линейная комбинация функций Гаусса и Лоренца. С учётом конкретной модели спектрометра подбиралась функция, наиболее точно описывающая профиль спектральных линий. В модели регистрируемого РИ рассчитанный вторичный спектр обрабатывался с использованием выбранной аппаратной функции. Рассмотрены способы расчёта коэффициентов пропорциональности для интенсивностей фонового и характеристического излучений на основе результатов измерений, проведённых на эталонных образцах.

Разработанная математическая модель спектра реализована поэтапно, путем включения в расчет новых, влияющих на результат, факторов. На каждом этапе проведена проверка достоверности полученной модели путем сравнения результатов расчетов со спектрами, представленными в литературе и с результатами собственных измерений.

**В четвертой главе диссертации** приводятся результаты экспериментальной проверки построенных моделей и рассмотрены вопросы применения разработанной лабораторной информационной системы в РФА.

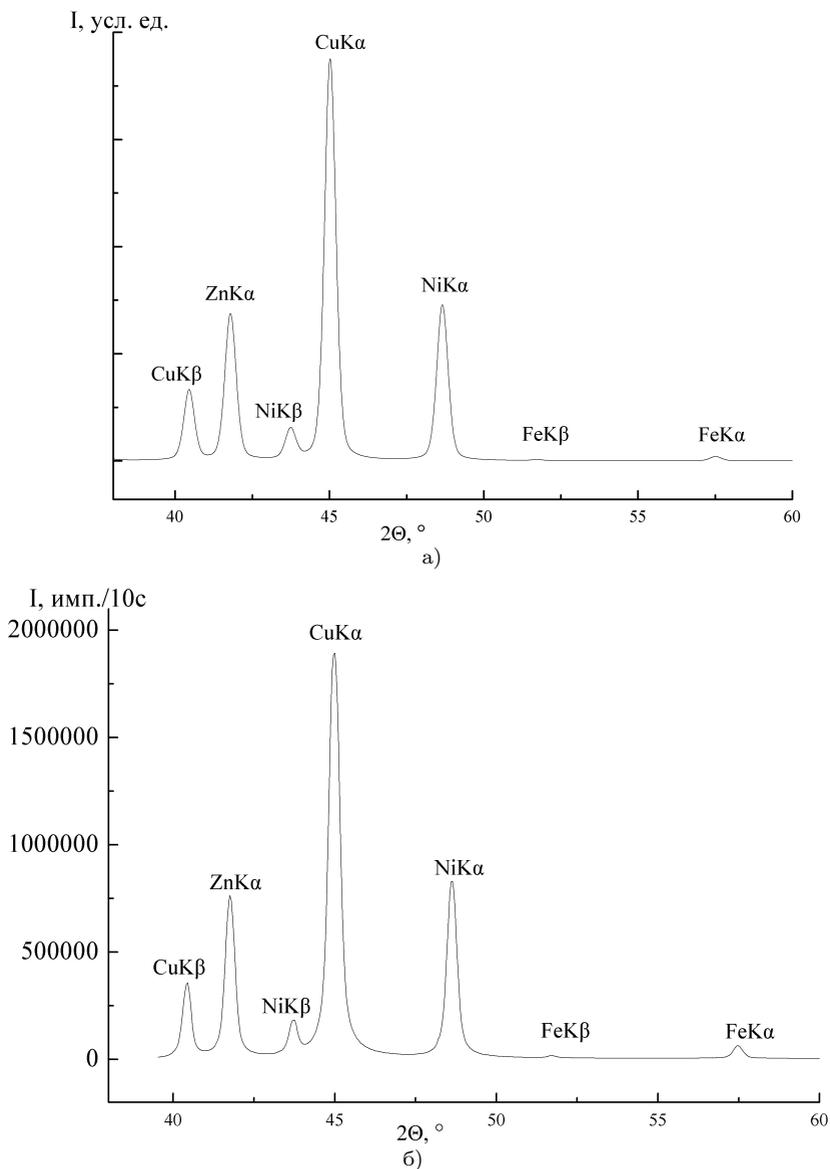


Рис. 6. Спектр пробы МНЦ 15-20 (комплект М 38, ГСО 2079-81-2083-81, образец №385), трубка Rh, напряжение на аноде 40кВ, кристалл-анализатор LiF (200), (а) результат моделирования, аппаратная функция — линейная комбинация функций Гаусса и Лоренца в соотношении 7:3, (б) — результат измерений

Экспериментальную проверку проводили с использованием рентгеновского спектрометра с дисперсией по длинам волн VRA-33 (Карл-Цейс, Германия) и набором кристаллов-анализаторов: LiF, PET, графит и др. В качестве образцов использованы растворы и сплавы известных составов. Типичные результаты сравнения построенной модели и экспериментальных исследований на примере части спектра стандартизированного образца ГСО 2079-81-2083-81 в составе Cu 61,44%, Ni 15,89%, Zn 21,38%, Fe 0,72%, Pb 0,015%, Mn 0,14%, Bi 0,0021%, Si 0,041% представлены на рис. 6.

Описано, как использование построенной количественной модели на этапе разработки методики эксперимента позволяет определять области спектра (точки измерения фона, точки измерения характеристических линий элемента), выбирать кристаллы-анализаторы, используемые в установке, а также параметры работы измерительной аппаратуры (силу тока и напряжение на трубке) и время счета квантов флуоресцентного излучения. Экспериментальная проверка возможностей определения количественного содержания элементов с заданной точностью с использованием разработанной ЛИС проведена для ряда образцов (GaAs, As<sub>2</sub>S<sub>3</sub>, Au, Nb, растворы солей меди, цинка, вольфрама, рения и др.).

**В заключении** сформулированы основные результаты и выводы диссертационной работы.

## Выводы

1. Разработана количественная модель возбуждения спектров рентгеновской флуоресценции в конденсированных средах полихроматическим рентгеновским излучением с энергией квантов 5 – 100 кэВ. В модели учтены следующие факторы: а) специфика формирования и спектральное распределение первичного излучения, источником которого является рентгеновская трубка; б) эффекты рассеяния и поглощения первичного и флуоресцентного излучения в веществе и элементах измерительной установки; в) эффекты вторичной флуоресценции. Осуществлён учёт условий проведения измерений и влияния измерительного оборудования на регистрируемый сигнал.
2. Проведена экспериментальная проверка возможностей применения разработанной модели для количественного описания рентгеновских спектров. Установлено, что предложенная модель позволяет проводить оценку распределения интенсивностей флуоресцентного и фонового излучений для различных конденсированных сред (твёрдых

тел и жидкостей), содержащих элементы с атомными номерами  $Z = 12 \dots 92$ .

3. Показано, что построенная модель может быть использована в РФА для прогнозирования и предварительной оценки результатов измерений и построения градуировочных характеристик. На основе разработанной модели предложен способ определения условий проведения эксперимента в РФА с целью получения результатов с необходимой точностью.
4. Показано, что применение разработанной лабораторной информационной системы позволяет существенно сократить время РФА единичных образцов за счёт оптимизации этапа разработки методики исследований и сокращения количества проводимых измерений.

### **Основные результаты работы отражены в следующих статьях**

1. Информационная лабораторная система для количественного рентгенофлуоресцентного анализа вещества / В. И. Петров, А. В. Романов, М. А. Степович, М. Н. Филиппов // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. — 2006. — № 9. — С.93–97.
2. Романов А. В., Степович М. А., Филиппов М. Н. Разработка программного обеспечения для математического моделирования спектров в рентгенофлуоресцентном анализе вещества // Прикладная физика. — 2007. — № 3. — С.124–128.
3. Романов А. В., Степович М. А., Филиппов М. Н. Моделирование процессов возбуждения рентгеновской флуоресценции для количественного рентгенофлуоресцентного анализа материалов // Перспективные материалы. — 2007. — № 3. — С.81–85.
4. Romanov A. V., Stepovich M. A., Filippov M. N. Software engineering for mathematical modeling of spectra in roentgenofluorescent analysis of solids // Proc. SPIE. — 2006. — Vol. 6278. — P. 62780-62788.
5. Романов А. В., Степович М. А., Филиппов М. Н. Учет аппаратных особенностей и матричных эффектов при разработке методики проведения рентгенофлуоресцентного анализа вещества // Вісник Черкаського державного технологічного університету. — 2006. — Спецвыпуск. — С. 66–68.
6. Романов А. В., Степович М. А., Филиппов М. Н. Разработка математической модели спектров вторичного излучения для рентгенофлуоресцентного анализа твердых тел // Радиационная физика твердого

- тела: Труды XVI международного совещания. — Севастополь, 2006. — С. 343–347.
7. Романов А. В., Степович М. А., Филиппов М. Н. Определение оптимальных условий проведения рентгенофлуоресцентного анализа вещества методами математического моделирования // Радиационная физика твердого тела: Труды XVII международного совещания. — Севастополь, 2007. — С. 592–599.
  8. Романов А. В., Степович М. А., Филиппов М. Н. О возможности автоматизации процесса качественного рентгенофлуоресцентного анализа вещества // Приборостроение–2004: Сб. трудов международной научно-технич. конф. — Винница, 2004. — С. 184–189.
  9. Romanov A. V., Stepovich M. A., Filippov M. N. Mathematical modeling of X-Ray spectra as the tool of raising of efficiency of roentgenofluorescent analysis of solids // Physics of electron materials: Proc. of 2th International Conference. — Kaluga, 2005. — Vol. 2. — P. 280–283.
  10. О возможности использования электронно-зондовых методов для оценки локального содержания радионуклидов в природных и производственных объектах / Т. А. Куприянова, Н. Н. Михеев, А. В. Романов и др. // Труды регионального конкурса научных проектов в области естественных наук. — Калуга: Полиграф-Информ, 2005. — Вып. 8. — С. 221–225.
  11. Романов А. В., Степович М. А., Филиппов М. Н. Разработка программного обеспечения для повышения эффективности рентгенофлуоресцентного анализа вещества // Труды Калужского государственного педагогического университета им. К.Э.Циолковского. Естественные науки. — Калуга, 2006. — С.66–70.

Романов Алексей Викторович

Возбуждение рентгеновской флуоресценции в конденсированных средах  
полихроматическим рентгеновским излучением

Автореферат  
диссертации на соискание ученой степени  
кандидата физико-математических наук

Тираж 100 экз. Зак. № 75/13  
Формат бумаги 60x84 1/16 Печ. л. 1  
Отпечатано АП „Полиграфия“, г.Калуга, ул.Тульская 13а.  
Лиц. ПЛД № 42-29 от 23.12.1999.