

12

## **Сравнение функции сбора рентгенофлуоресцентного сигнала для двух типов коллиматоров**

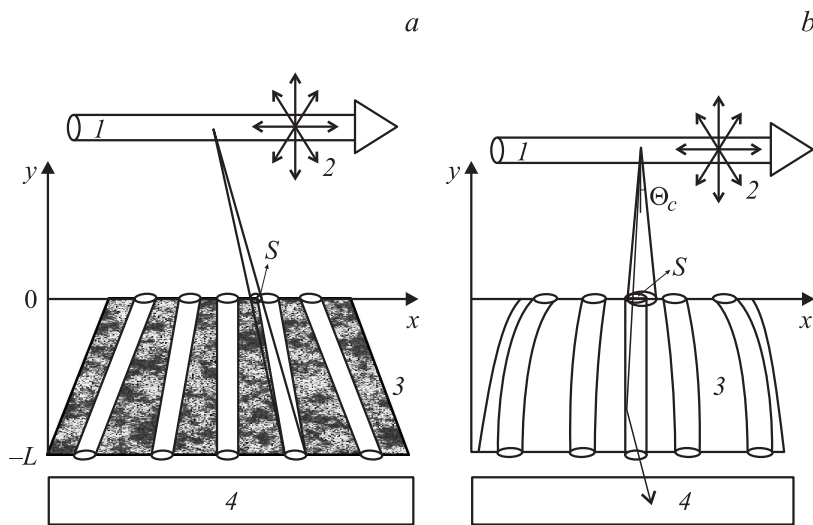
© Я.Л. Шабельникова, М.В. Чукалина

Институт проблем технологии микроэлектроники и особочистых  
материалов РАН, Черноголовка  
E-mail: janeshabeln@yandex.ru

*Поступило в Редакцию 10 января 2012 г.*

Для поликапиллярного коллиматора и коллиматора, созданного методами микроэлектроники, используемыми в конфокальной схеме рентгенофлуоресцентной томографии, представлены результаты моделирования функции сбора сигнала. Проводится сравнение размеров областей сбора этих коллиматоров. Для коллиматора, созданного методами микроэлектроники, приведена оценка доли квантов, проходящих через коллиматор за счет полного внешнего отражения от стенок каналов. Показано, что при определенном выборе параметров коллиматора вкладом таких квантов в функцию сбора можно пренебречь.

Метод рентгеновской флуоресцентной томографии применим для исследования широкого класса объектов любой степени упорядоченности, что является одной из причин его растущей популярности. Действительно, этот инструмент способен давать информацию о распределении элементного состава объектов с пространственным разрешением порядка микрометров и позволяет регистрировать низкие (порядка сотых долей процента) концентрации элементов [1–3]. При проведении экспериментов по рентгенофлуоресцентной томографии в конфокальной схеме исследуемый объект освещается сфокусированным пучком рентгеновских лучей. Под их воздействием атомы образца испускают флуоресцентные кванты. Пересечение падающего пучка и фокального пятна коллиматора, установленного перед окном детектора, образует „фокальный объем“, которым сканируется образец (рис. 1, *a*). Флуоресцентное излучение, собираемое из объема, регистрируется детектором. По результатам обработки спектра зарегистрированного излучения рассчитывают концентрации элементов в данном объеме образца.



**Рис. 1.** Пояснения к расчету угла сбора микроэлектронного (*a*) и поликапиллярного (*b*) коллиматоров; 1 — рентгеновский пучок, 2 — флуоресцентные кванты, 3 — коллиматор, 4 — детектор.

Поликапиллярный коллиматор используют в экспериментах по конфокальной томографии на синхротронах (BESSY, DESY, ESRF) уже около десяти лет (например, [1,4]). Он представляет собой конструкцию из плотно упакованных изогнутых стеклянных капилляров. На переднем торце коллиматора все капилляры направлены в одну точку — фокус коллиматора, а на заднем торце параллельны друг другу. Работа такого коллиматора основана на эффекте полного внешнего отражения (ПВО). Рентгеновские лучи, попадающие на стенки капилляра под углом, меньшим, чем критический угол ПВО, испытывая многократные отражения, проходят через него и попадают в детектор.

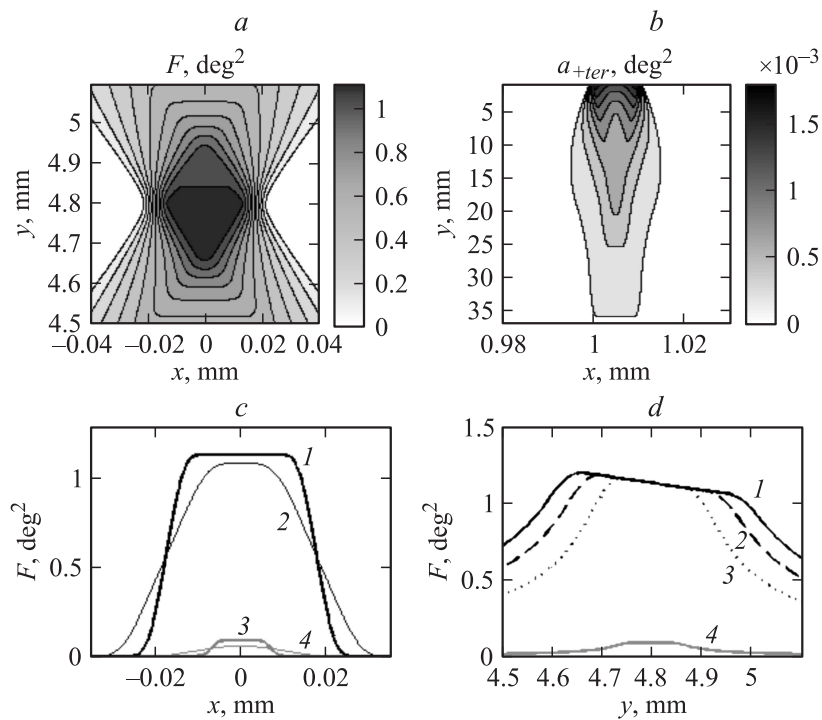
Коллиматор, созданный методами микроэлектроники, представляет собой систему каналов в поглощающей матрице, направленных в одну точку — фокус коллиматора. Идея создания и реализация этого коллиматора появились сравнительно недавно [5]. И поэтому важно сравнить его возможности с широко используемым поликапилляром.

Под функцией сбора коллиматора  $F$  понимается отношение интенсивности флуоресцентных квантов, попавших в детектор из данной точки, к интенсивности испущенных в этой точке флуоресцентных квантов.

Функция сбора микроэлектронного коллиматора рассчитывалась как суммарное распределение углов сбора всех каналов. Под углом сбора  $\alpha(x, y)$  одного канала понимается угол, флуоресцентное излучение из которого может пройти через этот канал. Ниже рассмотрена доля излучения, которое проходит „на просвет“. Оценка доли излучения, проходящего за счет ПВО, приведена в конце работы. Для геометрических характеристик коллиматора введены обозначения:  $d_1$  — диаметр переднего торца,  $d$  — ширина канала,  $L$  — длина коллиматора,  $F$  — фокусное расстояние,  $\Omega = d_1/F$  — угол раствора коллиматора,  $N$  — число каналов. На рис. 1, *a* показана схема, поясняющая логику расчета угла сбора. Угол сбора определяется площадью  $S$ , а именно  $\alpha = S/y^2$ .

Для поликапиллярного коллиматора также введены обозначения:  $d_1$  — диаметр переднего торца,  $F$  — фокусное расстояние,  $\Omega = d_1/F$  — угол раствора коллиматора,  $d$  — диаметр капилляра,  $N$  — количество капилляров,  $\Theta_c$  — критический угол ПВО. Функция сбора рассчитывается как сумма распределений углов сбора отдельных капилляров. Причем под углом сбора  $\alpha(x, y)$  подразумевался угол, из которого излучение собирается в капилляр. Ослабление интенсивности при многократных отражениях в капилляре не учитывалось. При условии эффективного захвата излучения (когда радиус кривизны капилляров больше критического  $R_{cr} = 2d/\Theta_c^2$ ) можно считать, что сбор излучения изогнутым капилляром аналогичен случаю неизогнутого наклонного капилляра. При этом за угол наклона неизогнутого капилляра берется угол наклона переднего края изогнутого капилляра. Расчет угла сбора поясняет рис. 1, *b*. Для точки наблюдения  $(x, y)$  лучи, которые могут проходить через капилляр за счет ПВО, сосредоточены внутри конуса с вершиной в  $(x, y)$ , углом раствора  $2\Theta_c$ ; ось конуса имеет тот же наклон, что и капилляр, т.е. угол сбора определяется обозначенной на рис. 1, *b* площадью  $S$  и  $\alpha = S/y^2$ .

Результаты модельных расчетов для функции сбора приведены на рис. 2. Представленные результаты получены для коллиматоров с  $d = 10 \mu\text{m}$ ,  $F = 4.8 \text{ mm}$ ,  $d_1 = 1.17 \text{ mm}$ ,  $\Omega \approx 0.24$ ,  $N = 100$ . Длина микроэлектронного коллиматора  $L = 12.4 \text{ mm}$ . Для поликапиллярного коллиматора показанная на рис. 2, *a*  $F$  и профили на рис. 2, *c* рассчитаны



**Рис. 2.** *a* — функция сбора рентгенофлуоресцентного сигнала поликапиллярного коллиматора; *b* — угол сбора центрального канала микроэлектронного коллиматора с учетом ПВО; *c* — профили функции сбора поликапиллярного коллиматора при  $y = 4.8$  mm (1) и при  $y = 4.7$  mm (2) и микроэлектронного коллиматора при  $y = 4.8$  mm (3) и  $y = 4.7$  mm (4); *d* — профили функции сбора при  $x = 0$  mm поликапиллярного коллиматора для  $\Theta_c = 4.6$  mrad (1),  $\Theta_c = 3.7$  mrad (2),  $\Theta_c = 2.6$  mrad (3) и микроэлектронного коллиматора (4).

при  $\Theta = 3.7$  mrad, что соответствует энергии  $K_\alpha$  линии меди 8 keV. Функция сбора микроэлектронного коллиматора имеет зависимость от пространственных координат, подобную показанной на рис. 2, *a*. Основные характеристики фокального пятна коллиматоров приведены в таблице. В ней под поперечным размером понимается ширина плоской (или соответственно ненулевой) части профиля функции сбора при

Сравнение основных параметров функций сбора коллиматоров

Размеры	Поликапиллярный коллиматор		Микроэлектронный коллиматор	
	Формула	Значение	Формула	Значение
Поперечный размер (ширина плоской части)	$2F\Theta_c - d$	$25.5 \mu\text{m}$	$d$	$10 \mu\text{m}$
Поперечный размер (ширина ненулевой части)	$2F\Theta_c + d$	$45.5 \mu\text{m}$	$\frac{d}{L}(2F + L)$	$18 \mu\text{m}$
Продольный размер	$\frac{2F\Theta_c - d}{\Omega}$	$210 \mu\text{m}$	$\frac{d}{\Omega}$	$80 \mu\text{m}$
Максимальное значение	$\frac{\pi d^2 N}{4F^2}$	$1.12 \text{ deg}^2$	$\frac{\pi d^2 N}{4(F+L)^2}$	$0.087 \text{ deg}^2$

$y = F = 4.8 \text{ mm}$ . Под продольным размером понимается ширина плоского участка профиля при  $x = 0 \text{ mm}$ . Из анализа рис. 2 и таблицы можно сделать вывод, что при одинаковых  $d$ ,  $F$ ,  $\Omega$  и  $N$  микроэлектронный коллиматор имеет меньший размер фокуса, чем поликапилляр, если  $d/L < \Theta_c$ . Однако и максимальное значение функции сбора у него меньше, чем у поликапилляра.

Важно также отметить, что функция сбора поликапиллярного коллиматора зависит от критического угла ПВО, а значит и от энергии флуоресцентных квантов (для стекла  $\Theta_c \approx 30 \text{ eV}/E$ , где  $E$  — энергия излучения). Зависимость функции сбора поликапилляра от энергии иллюстрирует рис. 2,  $d$ , на котором показаны профили функции сбора при  $x = 0 \text{ mm}$  для  $\Theta_c = 4.6 \text{ mrad}$  (соответствует  $E_{\text{FeK}\alpha} = 6.4 \text{ keV}$ ) (1),  $\Theta_c = 3.7 \text{ mrad}$  ( $E_{\text{CuK}\alpha} = 8 \text{ keV}$ ) (2) и  $\Theta_c = 2.6 \text{ mrad}$  ( $E_{\text{SeK}\alpha} = 11.2 \text{ keV}$ ) (3). Поэтому в рентгенофлуоресцентном анализе, когда с помощью коллиматора регистрируется протяженный (3–23 keV) энергетический спектр, нужно знать функцию сбора поликапиллярного коллиматора и вносить поправки в анализ регистрируемого спектра. В случае же коллиматора, созданного методами микроэлектроники, функции сбора сигнала не зависит от энергии излучения, что является еще одним его преимуществом. Разумеется, это верно только в том случае, если доля квантов, проходящих через коллиматор за счет ПВО, пренебрежимо мала.

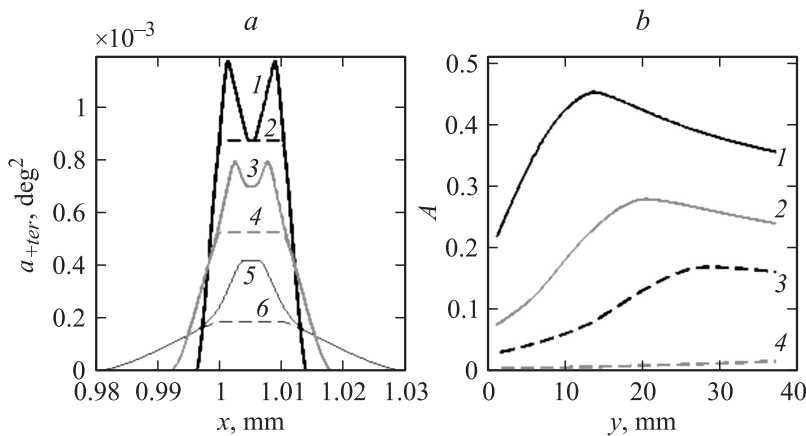
Оценим, какой вклад в угол сбора микроэлектронного коллиматора вносят кванты, проходящие через коллиматор в результате ПВО от стенок каналов. В коллиматоре, созданном методами мик-

роэлектроники, отражение от стенок каналов сильно подавлено из-за рассеяния на шероховатостях, размер которых может достигать величины  $\sigma = 100 \text{ nm}$ . Рассеяние на шероховатостях описывает фактор Дебая–Валлера  $\exp(-4\pi\sigma\theta/\lambda)^2$ , где  $\lambda$  — длина волны излучения,  $\theta$  — угол падения на стенку канала,  $\sigma$  — среднеквадратичный размер шероховатостей. Обозначим  $\Theta_m$  угол, при котором коэффициент отражения уменьшается в 100 раз за счет влияния фактора Дебая–Валлера:

$$\exp\left(-\left(\frac{4\pi\sigma\Theta_m}{\lambda}\right)^2\right) = 0.01 \Rightarrow \Theta_m = \frac{\sqrt{2 \ln 10} \lambda}{4\pi\sigma}.$$

Нетрудно убедиться, что  $\Theta_m$  меньше, чем  $\Theta_c$ , для стекла. Поглощающая матрица коллиматора должна быть сделана из тяжелого (с большим атомным номером  $Z$ ) материала. Критический угол ПВО растет с увеличением  $Z$ , поэтому можно ожидать, что критический угол ПВО для материала коллиматора будет больше значений  $\Theta_c$  для стекла и превысит значения  $\Theta_m$  для всего рассматриваемого диапазона длин волн  $4.1\text{--}0.5 \text{ \AA}$  (соответствует энергиям  $3\text{--}23 \text{ keV}$ ). Значит, при учете доли квантов, прошедших через коллиматор в результате ПВО, роль играет угол  $\Theta_m$ , а не критический угол ПВО. Будем считать, что излучение, попавшее на стенки канала коллиматора под углом  $\theta \leq \Theta_m$ , отражается и попадает в детектор, а излучение, падающее под углом  $\theta > \Theta_m$ , в детектор не попадает.

Чтобы получить оценку относительного вклада ПВО, достаточно рассмотреть угол сбора одного (центрального) канала. Когда параметры коллиматора удовлетворяют соотношению  $d/L < \Theta_m$ , профили угла сбора, рассчитанные с учетом и без учета ПВО, имеют тот же вид, что и кривые 1 и 3 на рис. 2, с с точностью до замены  $\Theta_c$  на  $\Theta_m$ . (Соотношения, описывающие высоту и ширину этих кривых, см. в таблице). Нетрудно убедиться, что в этом случае пренебречь ПВО не удастся. Однако для коллиматора с  $d = 10 \mu\text{m}$ ,  $L = 12.4 \text{ mm}$  для энергий  $3\text{--}23 \text{ keV}$  выполняется соотношение  $d/L > \Theta_m$ . Результат расчета угла сбора центрального канала с учетом ПВО  $\alpha_{+ter}(x, y)$  для  $\Theta_m = 0.26 \text{ mrad}$ , что соответствует  $E_{\text{CuK}\alpha} = 8 \text{ keV}$  и  $\sigma = 100 \text{ nm}$ , показан на рис. 2, b. Для этого значения  $\Theta_m$  относительный вклад ПВО в угол сбора  $(\alpha_{+ter} - \alpha)/\alpha_{+ter}$  не превышает 60%. На рис. 3, a приведены срезы (профили) показанного на рис. 2, b угла сбора для  $y < d/(2\Theta_m) - L$  (1),  $d/(2\Theta_m) - L < y < d/(2\Theta_m)$  (3) и  $y > d/(2\Theta_m)$  (5). Пунктирными линиями (2), (4) и (6) показаны соответствующие профили угла



**Рис. 3.** *a* — профили угла сбора с учетом ПВО при  $y = 4.8$  mm (1), 9.8 mm (3) и 24.8 mm (5); пунктирные линии 2, 4, 6 — профили угла сбора без учета ПВО при соответствующих значениях  $y$ ; *b* — относительный вклад ПВО в интегральный по  $x$  угол сбора для  $\Theta_m = 0.37$  mrad (1),  $\Theta_m = 0.26$  mrad (2),  $\Theta_m = 0.19$  mrad (3) и  $\Theta_m = 0.08$  mrad (4).  $d = 10 \mu\text{m}$ ,  $L = 12.4$  mm,  $\sigma = 100$  nm.

сбора без учета ПВО. По этим кривым видно, что при увеличении  $y$  растет вклад ПВО в угол сбора. Вклад ПВО для разных длин волн удобнее характеризовать, рассматривая интегральный по  $x$  угол сбора  $a_{+ter}(y) = \int \alpha_{+ter}(x, y) dx$ . Относительный вклад ПВО в интегральный по  $x$  угол сбора  $(a_{+ter} - a)/a_{+ter}$  показан на рис. 3, *b* для  $\Theta_m = 0.37$  mrad (1),  $\Theta_m = 0.26$  mrad (2),  $\Theta_m = 0.19$  mrad (3),  $\Theta_m = 0.08$  mrad (4), что соответствует энергиям 5.6, 8, 11.2 и 23 keV и  $\sigma = 100$  nm. Когда фокусное пятно коллиматора не сильно вытянуто вдоль оси  $Oy$ , можно считать, что величина  $A(y) = (a_{+ter} - a)/a_{+ter}$  характеризует вклад ПВО в функцию сбора коллиматора при фокусном расстоянии  $F = y$ , т.е. для энергий выше 5.6 keV вклад в районе фокальной плоскости (4.8 mm) не превышает 50% для  $d = 10 \mu\text{m}$ ,  $L = 12.4$  mm и  $\sigma = 100$  nm.

В целом же можно сделать вывод, что вкладом ПВО в функцию сбора микроэлектронного коллиматора можно пренебречь, если  $d/L > \Theta_m$  и фокусное расстояние  $F < d/(2\Theta_m) - L$ . Последнее условие

означает, что фокусное пятно лежит в области  $y < d/(2\Theta_m) - L$ , когда профиль добавки к углу сбора в силу учета ПВО имеет характерный вид „кошачьих ушек“, типа кривой ( $I$ ) на рис. 3, а.

Таким образом, в результате расчетов и сравнения функций сбора сигнала видны преимущества коллиматора, созданного методами микроэлектроники: меньший размер фокального пятна при одинаковых параметрах и отсутствие зависимости функции сбора от энергии регистрируемых квантов. Из недостатков следует отметить более низкий уровень сигнала, что может быть скомпенсировано за счет увеличения числа каналов.

## Список литературы

- [1] Vincze L., Vekemans B., Brenker F.E., Falkenberg G., Rickers K., Somogyi A., Kersten M., Adams F. // *Anal. Chem.* 2004. V. 76. P. 6786–6791.
- [2] Janssens K., Proost K., Falkenberg G. // *Spectrochim. Acta. B.* 2004. V. 59. N 533. P. 1637–1645.
- [3] Malzer W. // *The Rigaku J.* 2006. V. 23. P. 40–47.
- [4] Wilke M., Appel K., Vincze L., Schmidt C., Borchert M., Pascarellie S. // *J. Synchrotron Radiation.* 2010. N 17. P. 669–675.
- [5] Chukalina M., Simionovici A., Zaitsev S., Vanegas C.J. // *Spectrochim. Acta. B.* 2007. V. 62. P. 544–548.