

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ В РЕНТГЕНОФЛУОРЕСЦЕНТНОМ АНАЛИЗЕ

Б.Д.Калинин, С.К.Савельев

ООО «Прецизионные технологии», Санкт-Петербург, *e-mail: kalinin_boris@mail.ru*

Эффективная работа по применению метода рентгенофлуоресцентного анализа (РФА) и разработке новых программных средств и оборудования, реализующего этот метод, требует осуществления большого количества достаточно громоздких и не простых расчетов. Современные РФ приборы, как правило, оснащены развитым и весьма эффективным программным обеспечением, обеспечивающим основные потребности пользователя. Однако это программное обеспечение рентгеновских спектрометров по вполне понятным причинам привязано к определенной марке прибора и реализует, как правило, ограниченный набор для реализации способов качественного и количественного анализа. К тому же хотя и не очень быстрый прогресс в способах обработки данных приводит к старению специализированных программных продуктов более быстрому, чем физический и моральный износ самой аппаратуры. Кроме того, в рассматриваемой области существует большое число задач, как правило, не охваченных программным обеспечением, поставляемым с оборудованием. Это ограничивает применение РФА к анализу новых материалов, затрудняет разработку новых способов анализа и затрудняет проводить исследования по совершенствованию аппаратуры.

Указанный пробел может восполнить лабораторный информационно-вычислительный комплекс, который должен содержать справочную базу по фундаментальным параметрам взаимодействия рентгеновского излучения с веществом, моделирующие программы, имитирующие генерацию рентгеновского излучения, возникновения флуоресцентного и рассеянного излучения при взаимодействии с анализируемым объектом, отклик элементов спектрометра на это излучение и реализовать различные способы построения градуировочной характеристики и проведения анализа. Подобный комплекс может быть реализован с применением справочно-вычислительной среды «X-ENERGO». Представляемый программный комплекс предназначен для следующих групп пользователей:

Уровень СТУДЕНТ. Для данной группы представляются уникальные возможности по ознакомлению с основными физическими эффектами, связанными с работой РФ приборов. Наличие программы виртуального спектрометра позволяет легко и наглядно продемонстрировать эффект от изменения в условиях анализа на регистрируемый спектр практически для образца произвольного состава, подобрать оптимальные условия анализа для заданной аналитической задачи.

Уровень ЭКСПЕРТ. Комплекс предлагает данному пользователю возможность детального исследования преобразования потока излучения в приборе от момента генерации возбуждающего излучения до формирования аппаратного спектра. Наборы программ, реализующих различные способы РФА, позволяют на основе комплекса реализовывать нестандартные способы обработки данных и вести разработку собственных способов анализа.

Уровень КОНСТРУКТОР. При разработке аппаратуры и отдельных узлов позволяет до проведения экспериментальных работ выбрать оптимальную компоновку спектрометра для получения необходимых аналитических характеристик прибора и метрологических параметров анализа.

Уровень ПРОДАВЕЦ. Не обладающие глубокими познаниями в РФА пользователи данной группы получают возможность без проведения измерений определить аналитические характеристики предлагаемых ими приборов в случае их применения для проведения определенного вида анализа тем самым, предоставляя в распоряжение потенциального покупателя достоверную и убедительную информацию по продвигаемому оборудованию.