05

К вопросу о спектральном разрешении фокусирующего Брэгг-спектрометра

© Т. Чен

Московская государственная академия тонкой химической технологии им. М.В. Ломоносова
E-mail: docent65@mtu-net.ru, ttchen@e-mail.ru

Поступило в Редакцию 12 апреля 2002 г.

Проведено теоретическое исследование влияния профиля интенсивности волны, сфокусированной изогнутым кристаллом, на разрешение фокусирующего брэгговского спектрометра, динамически отражающего жесткое рентгеновское излучение ($\lambda \sim 1\,\text{Å}$). Обсуждается брэгговский нефокусирующий спектрометр на основе плоского кристалла в сравнении с фокусирующим спектрометром. Формулируются условия разрешимости спектральных линий для обоих типов спектрометров.

Изогнутые кристаллы широко используются в последнее время в качестве спектрометров рентгеновского излучения [1–10].

В настоящей работе теоретически анализируется вопрос о влиянии формы кривой распределения интенсивности дифрагированной волны на спектральное разрешение фокусирующего изогнутого кристалл-спектрометра. Будем считать, что радиус изгиба кристалла R_x в плоскости дифракционного рассеяния удовлетворяет условию „слабого“ изгиба [11]:

$$R_x \gg \varkappa\Lambda^2\big|(1-\gamma_0^2)/\gamma_0 - (1-\gamma_h^2)/\gamma_h\big|/(4\pi^2).$$

Тогда плосковолновый амплитудный коэффициент отражения можно аппроксимировать выражением для соответствующего коэффициента плоского (неизогнутого) кристалла. Как следует из [11,12], амплитуда дифрагированной волны в вакууме в точке ξ_p:

$$E_h(\xi_p) \sim \int\limits_{-\infty}^{+\infty} dk G_h(k+q_0)\exp\big[-ik^2(1/\alpha_0+1/\alpha_h)/2\varkappa + ik\gamma_h\xi_p/\alpha_h L_h\big], \quad (1)$$

где $G_h(k+q_0)$ — фурье-компонента функции Грина для дифрагированной волны, $\alpha_0 = \gamma_0^2/L_0 - \gamma_0/R_x$, $\alpha_h = \gamma_h^2/L_h + \gamma_h/R_x$, $\gamma_{0,h}$ — направляющие косинусы для падающей и дифрагированной волн, $L_{0,h}$ — расстояния от точечного источника сферической волны до кристалла и от кристалла до изображения источника, $\varkappa = 2\pi/\lambda$, λ — длина волны падающего излучения, явный вид q_0 приведен в [11]. Выражение (1) получено для случая параболического разложения фазы падающей сферической волны.

$$G_h(k+q_0) = 2i/\left(k+q_0+\{(k+q_0)^2-\pi^2/a^2\Lambda^2\}^{1/2}\right),$$

$a = \sin(\varphi_0 - \varphi_h)/(2\gamma_0|\gamma_h|)$, $\varphi_{0,h}$ — углы между падающей волной и нормалью к поверхности кристалла и между дифрагированной волной и нормалью, $\Lambda = \lambda(\gamma_0|\gamma_h|)^{1/2}/C|\chi_h\chi_{-h}|^{1/2}$ — экстинкционная длина, $\chi_{h,-h}$ — фурье-компоненты рентгеновской поляризуемости, C — поляризационный фактор.

Из (1) видно, что если $\alpha_h = -\alpha_0$, то интеграл (1) вычисляется аналитически точно и сводится к функции Бесселя первого рода $J_1(t_\xi)$:

$$I_h(\xi_p) \sim \left|J_1(t_\xi)/t_\xi\right|^2\Theta(t_\xi). \tag{2}$$

Здесь $t_\xi = 2\xi_p\gamma_h\sigma_h/\alpha_h L_h$, $\sigma_h = \varkappa\chi_h/4\cos\theta_B$, $\Theta(t_\xi)$ — функция Хевисайда.

В работах [11,13] было показано, что если источник расположен на круге Роуланда ($L_0 = R_x\gamma_0$), то происходит фокусировка по Иоганну и интенсивность вблизи изображения точечного источника распределена по закону:

$$I_{h,\mathrm{Johann}}(\xi_p) \sim \left|\sin(t_\xi)/t_\xi\right|^2, \quad t_\xi = \varkappa x_{eff}\xi_p/2R_x, \tag{3}$$

где x_{eff} — длина дифракционного отражения согласно [11,13].

Теоретический предел спектрального разрешения фокусирующего спектрометра Иоганна, полученный в [11,13], составляет $d\lambda/\lambda \sim 10^{-8}$. Понятно, что величина спектрального разрешения определяется линейной дисперсией $D_\xi = d\xi_p/d\lambda$ и профилем кривой распределения интенсивности.

Полученная в [11,13] оценка спектрального разрешения соответствует пространственному разрешению, равному дифракционному уширению изображения точечного источника $\Delta\xi_p$. Величина $\Delta\xi_p$ следует из формулы (3), если положить $t_\xi = \pi$, т. е. главный максимум интенсивности для спектральной линии $(\lambda + d\lambda)$ приходится на первый нуль интенсивности для линии λ. Суммарная наблюдаемая интенсивность от двух спектральных линий имеет при $t_\xi = \pi/2$ „провал“ $\approx 19\%$.

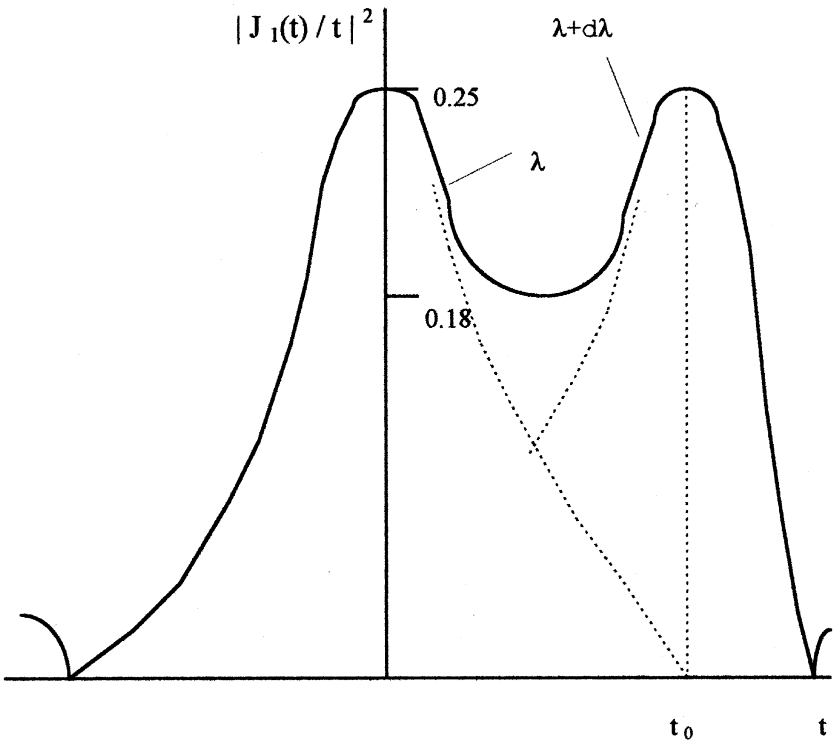

Рис. 1. Распределение интенсивности волны вблизи изображения точечного источника для двух спектральных линий λ и $(\lambda+d\lambda)$. Цилиндрически изогнутый кристалл. $L_0 \neq R_x\gamma_0$.

Можно считать, что условие $t_\xi = \pi$ является критерием разрешимости спектральных линий для спектрометра Иоганна, подобно известному оптическому критерию Рэлея.

В случае, если источник не находится на круге Роуланда, для разрешения линий λ и $(\lambda + d\lambda)$ также потребуем, чтобы главный максимум интенсивности линии $(\lambda + d\lambda)$ совпал с первым нулем $(t_0 \cong 3.85)$ функции Бесселя $J_1(t_\xi)$ (рис. 1). Анализ показывает, что при этом интенсивность между линиями „падает“ на 28%, т.е. линии разрешены. Отметим, что при $L_0 \neq R_x\gamma_0$ условие $t_\xi = \pi$ уже

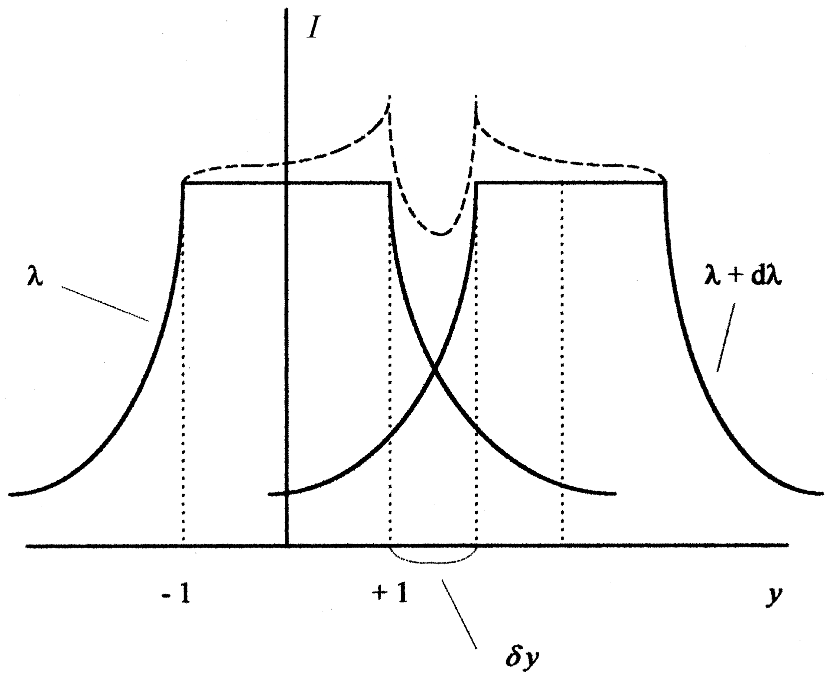

Рис. 2. Угловое распределение интенсивности (I) дифрагированной волны для двух спектральных линий λ и $(\lambda + d\lambda)$ для случая сферической падающей волны. Плоский кристалл.

не достаточно для надежного разрешения линий, так как суммарная интенсивность при $t_\xi = \pi/2$ практически равна максимальной интенсивности для обеих линий. Следует заметить, что разложение в спектр происходит благодаря эффекту фокусировки в плоскости наблюдения на расстоянии L_h от кристалла.

Рассмотрим теперь расфокусирующий спектрометр на основе плоского кристалла. В этом случае $\alpha_h \neq \alpha_0$ и для анализа интеграла (1) воспользуемся методом стационарной фазы. Стационарная точка $k_{\text{stat}} = -\varkappa\xi_p/\{\gamma_h(1/\alpha_0 + 1/\alpha_h)\}$. Пространственное распределение интенсивности определяется квадратом модуля функции

$|G_h(k_{\text{stat}} + q_0)|^2$, аргумент которой сведем к обычной угловой переменной y, а саму функцию — к виду, более подходящему для практических расчетов: $|y - (y^2 - 1)^{1/2}|^2$. Для симметричной геометрии дифракции σ-поляризованной волны: $y = (\Delta\theta \sin\theta_B + \chi_0)/(\chi_h\chi_{-h})^{1/2}$, где $\Delta\theta = \theta - \theta_B$ — отклонение от точного брэгговского угла. Ясно, что при отсутствии фокусировки в каждую точку ξ_p „приходит" только один парциальный луч, отраженный плоским кристаллом, т.е. координата ξ_p зависит однозначно от $\Delta\theta$. Спектр от плоскокристаллического спектрометра наблюдается обычно вблизи от кристалла в отличие от фокусирующего спектрометра. Понятно, что наличие области полного отражения („плоский" участок кривой на рис. 2) ухудшает спектральные характеристики плоскокристального спектрометра по сравнению с фокусирующим спектрометром. Пусть расстояние между правым краем кривой отражения для линии λ $(y = 1)$ и левым краем кривой для линии $(\lambda + d\lambda)$ равно δy. Потребуем, чтобы величина „провала" интенсивности между линиями была не меньше 20%. Тогда, положив $\delta y \ll 1$, имеем неравенство:

$$1 + \delta y/2 - (\delta y)^{1/2} \leqslant (0.4)^{1/2}. \tag{4}$$

Решая неравенство (4) с учетом $\delta y \ll 1$ получим:

$$\delta y \geqslant \left[1 - \{1 - 2(1 - (0.4)^{1/2})\}\right] \approx 0.735, \tag{5}$$

откуда $\delta(\Delta\theta) \geqslant |\chi_{hr}|(2 + \delta y)/\sin 2\theta_B$.

С помощью закона Брэгга получим оценку спектрального разрешения для плоскокристаллического спектрометра:

$$d\lambda/\lambda \geqslant \operatorname{ctg}\theta_B \delta(\Delta\theta). \tag{6}$$

Для отражения (220), CuK$_\alpha$-излучения от кристалла Si получим $d\lambda/\lambda \geqslant 7.7 \cdot 10^{-5}$, что примерно на 2–3 порядка хуже, чем для фокусирующего спектрометра.

Отметим, что современный уровень развития измерительной аппаратуры позволяет различать интенсивности, отличающиеся меньше, чем на 20%, что позволяет несколько улучшить теоретические оценки для спектрального разрешения, полученные в настоящей работе.

Список литературы

[1] *Hölzer G., Wehrhan O., Heinish J.* et al. // Phys. Scripta. 1998. V. 57. P. 301–309.

[2] *Hölzer G., Wehrhan O., Förster E.* // Cryst. Res. Technol. 1998. V. 33. P. 555–567.

[3] *Renner O., Mißalla T., Sondhauß P.* et al. // Rev. Sci. Instr. 1997. V. 68. P. 2393–2403.

[4] *Hamalainen K., Krish M., Kao C.C.* et al. // Rev. Sci. Instr. 1995. V. 66. P. 1525–1527.

[5] *Lehnert U., Zschornack G.* // Journal of X-Ray Sc. and Techn. 1996. V. 6. P. 83–93.

[6] *Fraenkel B.S., Bitter M., Von Goeler S., Hill K.* // Journal of X-Ray Sc. and Techn. 1998. V. 8. P. 171.

[7] *Hölzer G., Förster E., Grätz M.* et al. // Journal of X-Ray Sc. and Techn. 1998. V. 8. P. 50.

[8] *Брызгунов В.А.* // ЖТФ. 2000. Т. 70. С. 49–51.

[9] *Латуш Е.М., Мазурицкий М.И.* // Письма в ЖТФ. 2002. Т. 28. В. 1. С. 49–53.

[10] *Латуш Е.М., Мазурицкий М.И.* // Письма в ЖТФ. 2002. Т. 28. В. 4. С. 35–40.

[11] *Габриелян К.Т., Чуховский Ф.Н., Пискунов Д.И.* // ЖЭТФ. 1989. Т. 96. В. 3 (9). С. 834–846.

[12] *Чен Т.* // ЖТФ. 2002. Т. 72. В. 7. С. 92–94.

[13] *Габриелян К.Т., Чуховский Ф.Н., Пинскер З.Г.* // ЖТФ. 1980. В. 8. С. 1641–1646.