

01;07

Светосильный фокусирующий рентгеновский дифрактор: компьютерное моделирование отражающей поверхности

© М.И. Мазурицкий, А.В. Солдатов, Е.М. Латуш,
В.Л. Ляшенко, А. Марчелли

Ростовский государственный университет

Поступило в Редакцию 29 апреля 1999 г.

В приближении точечного источника рентгеновского излучения рассчитаны модели новых типов ступенчатых рентгеновских дифракторов с эллипсоидальной и тороидальной поверхностью ступенек. Методом Монте-Карло получено изображение дифракционных зон отражения, исследовано влияние кривизны поверхности на форму и площадь этих зон.

Основными диспергирующими элементами, позволяющими выделить рентгеновское излучение заданного интервала длин волн, являются совершенные и мозаичные кристаллы: кварц, кремний, германий, фтористый литий, слюда, графит и др. Традиционные кристалл-дифракционные методы в применении к разложению в спектр рентгеновского излучения разработаны и описаны достаточно полно [1–5]. В них используется отражение от системы атомных плоскостей кристалла, происходящее под углом скольжения θ (между падающим лучом и касательной плоскостью в точке падения). Условие интерференционного усиления удовлетворяет соотношению Брэгга

$$n\lambda = 2d \sin \theta, \quad (1)$$

где n — порядок дифракции, λ — длина волны излучения, d — межплоскостное расстояние. Для всех дифрагированных лучей выполняется условие (1). Разрешающая сила тем выше, чем меньше величина параметра $\Delta\lambda/\lambda(\Delta E/E)$, значение которого определяется мозаичным несовершенством используемого кристалла, методом разложения в спектр рентгеновского излучения, а также размером отражающей брэгговской поверхности кристалла-дифрактора. Под брэгговской (дифракционной) зоной отражения понимают совокупность точек на

поверхности кристалла, для которых при заданном интервале значений длин волн $\lambda - \Delta\lambda \leq \lambda \leq \lambda + \Delta\lambda$ угол скольжения, удовлетворяющий уравнению (1), находится в пределах $\theta - \Delta\theta \leq \theta \leq \theta + \Delta\theta$. При этом значение $\Delta\theta$ определяется из условия

$$\Delta\theta = (\Delta\lambda/\lambda) \operatorname{tg} \theta. \quad (2)$$

Обычно на практике выбирают такой кристалл, чтобы его собственная величина мозаичности $\Delta\theta$, определяемая из кривой качания, была меньше или равна той, что задается размером отражающей брэгговской зоны.

Очевидно, что, чем больше $\Delta\theta$, тем больше площадь дифракционной зоны и, как следствие, больше величина интенсивности спектров. Обычно требуется обеспечить компромисс между достаточно высоким спектральным разрешением (ассоциируемым с малой отражающей площадью кристалла) и большой апертурой дифрактора. В настоящее время для монохроматизации рентгеновского излучения используют отражение от плоских или изогнутых кристаллов. Последние применяются для точечных источников излучения и позволяют обеспечивать фокусировку лучей заданной длины волны в приемное окно детектора.

В настоящей работе предложен новый метод численного моделирования формы дифракционной зоны на поверхности изогнутого кристалла. Настоящий подход позволяет с высокой точностью определить требуемые геометрические параметры, в частности для нового класса дифракторов [6–8], имеющих сложную ступенчатую поверхность.

Рассмотрение проведено на примере эллипсоидального и тороидального изгибов. Цилиндрический и сферический изгибы могут рассматриваться как частные случаи эллипсоидального. Метод применим для произвольного фиксированного разрешения и углового интервала $\Delta\theta$. Суть метода состоит в следующем. Аналитически получена функция скалярного произведения двух векторов, направленных из точки $P(XYZ)$, лежащей на поверхности кристалла-дифрактора (рис. 1): вектора \mathbf{n} нормали к поверхности и вектора \mathbf{PS} , направленного из дифракционной зоны в точку S на круге фокусировки, где находится источник. Угол между этими векторами равен $90^\circ - \theta$, так как SP является лучом, попавшим в точку P атомной плоскости кристалла:

$$\Phi(X, Y, Z) = \frac{(\mathbf{n} \cdot \mathbf{PS})}{|\mathbf{n}| \cdot |\mathbf{PS}|} = \sin(\theta \pm \Delta\theta). \quad (3)$$

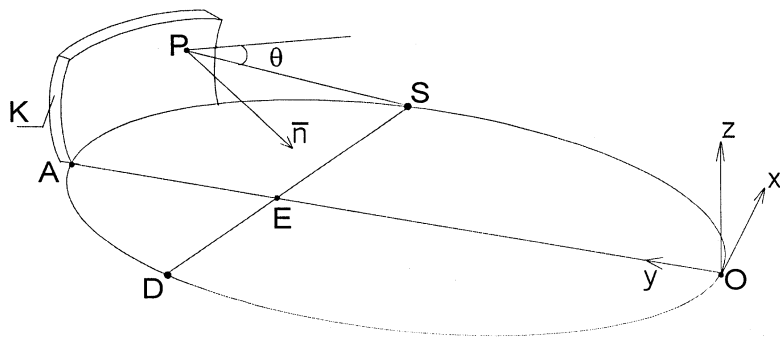


Рис. 1. Расположение системы отсчета, круга фокусировки, источника излучения S и вектора нормали \mathbf{n} в точке P , расположенной на поверхности изогнутого кристалла K .

Точка с координатами (X, Y, Z) попадает в брэгговскую зону отражения, если угол θ составляет величину, находящуюся в интервале $(\theta \pm \Delta\theta)$. Следовательно, условие, определяющее попадание точки в зону дифракции, имеет вид:

$$\sin(\theta - \Delta\theta) \leq \Phi(X, Y, Z) \leq \sin(\theta + \Delta\theta). \quad (4)$$

В нашем случае использовался метод Монте-Карло для визуализации дифракционной области отражения кристалла, а также для оценки величины ее относительной площади поверхности. Расчеты проведены на компьютере типа Pentium IBM PC. Точка $P(X, Y, Z)$ изображалась на экране и считалась находящейся в пределах дифракционной зоны отражения, если для соответствующих значений (X, Y, Z) выполнялось условие (4). Координатами X, Z служили случайные числа, которые "разыгрывались" с использованием стандартного генератора псевдослучайных чисел. Значения Y вычислялись из нижеприведенных уравнений, задающих кривизну изгиба кристаллографических плоскостей.

Как известно, уравнение эллипсоида вращения, представляющего в плоскости XU окружность радиуса a , имеет вид

$$X^2 + Y^2 + \left(\frac{a}{b}\right)^2 \cdot Z^2 = 1, \quad (5)$$

где X, Y, Z — безразмерные величины, заданные в долях величины a .

Уравнение тора, имеющего a — радиус осевой окружности в плоскости XY и b — радиус окружности вращения вокруг оси Z , имеет вид

$$X^2 + Y^2 = \left(\frac{a}{a+b} + \sqrt{\left(\frac{b}{a+b} \right)^2 - Z^2} \right)^2, \quad (6)$$

где X, Y, Z — безразмерные величины, заданные в долях величины $(a+b)$.

Вектора нормали \mathbf{n} в точке $P(X, Y, Z)$ и вектор \mathbf{PS} записываются следующим образом:

$$\mathbf{PS} = (\cos \theta \cdot \sin \theta - X) \cdot \mathbf{i} + (\cos^2 \theta - Y) \cdot \mathbf{j} - Z \cdot \mathbf{k}, \quad (7)$$

$$\mathbf{n} = -X \cdot \mathbf{i} - Y \cdot \mathbf{j} - \beta \cdot Z \cdot \mathbf{k}, \quad (8)$$

$$\beta = 1/\gamma^2, \quad \gamma = b/a \quad \text{для эллипсоида вращения}, \quad (9)$$

$$\beta = \frac{(1-\gamma) + \sqrt{\gamma^2 - Z^2}}{\sqrt{\gamma^2 - Z^2}}, \quad \gamma = \frac{b}{a+b} \quad \text{для тора}. \quad (10)$$

На рис. 2 для эллипсоида и тора представлены графики зависимости площади дифракционной зоны от параметров кривизны изгиба кристалла. Вдоль вертикальной оси отложены значения площади, нормированной на соответствующую величину для сферического кристалла S_1 . Обе кривые имеют немонотонный характер. Максимум C на обоих графиках соответствует такому соотношению между параметрами, при котором эллипсоид и тор вырождаются в сферу. Это происходит, когда кривизна в плоскости XY равна кривизне кристалла в плоскости YZ , что соответствует $a = b$ для эллипсоида и $a + b \cong b$ ($a \ll b$) для тора. Максимум B для эллипсоидального дифрактора достигается при значении $b = a \sin(\theta)$, которое равно расстоянию от источника S до вершины A изогнутого кристалла. Для тора положение первого пика соответствует другому значению радиуса кривизны в плоскости YZ : $b = (a + b) \cdot \sin^2(\theta)$. Иными словами, радиус изгиба в плоскости YZ равен длине отрезка EA (рис. 1). В плоскости круга фокусировки это расстояние от точки пересечения хорды, соединяющей источник S и детектор D , до вершины кристалла. На рис. 2 изображены также фигуры дифракционных зон, полученные методом Монте-Карло для различных значений параметра γ . Безразмерный параметр γ , согласно

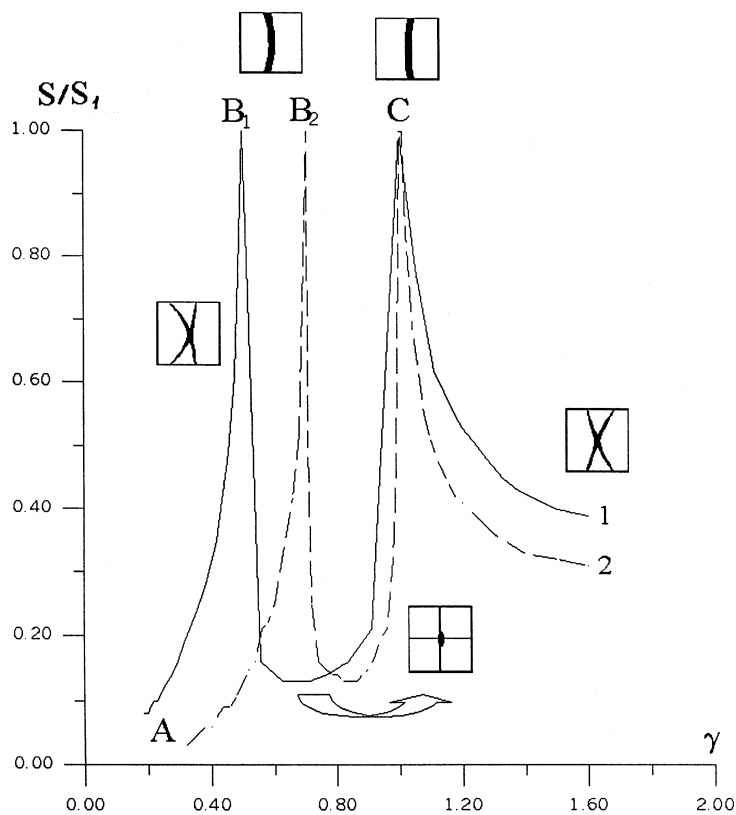


Рис. 2. Графики зависимости приведенной площади дифракционной зоны от параметров кривизны изгиба кристалла: 1 — для тора, 2 — для эллипсоида. На вставках приведены изображения зон брэгговской дифракции в области параметров, соответствующих ближайшим точкам кривой.

(9), (10), равен отношению b/a для эллипсоида и $b/(a + b)$ для тора. Видно, что с изменением этого параметра значительно изменяется форма брэгговской зоны.

Недавно были предложены [6–8] новые принципы построения дифракторов для рентгеновской спектроскопии и микроанализа, обла-

дающие одновременно высокой светосилой и высоким спектральным разрешением. Описанный в настоящей работе подход позволил рассчитать оптимальные параметры изгиба кристаллических плоскостей для этих новых типов рентгеновских дифракторов. В частности, в работе [8] доказана эффективность применения нового псевдосферического ступенчатого дифрактора для рентгеновского микроанализатора SAMEBAX (фирмы CAMECA).

Список литературы

- [1] *Michette A.G.* // Optical System for Soft X ray. New York: Plenum Press, 1986. P. 351.
- [2] *Freund A.K.* // X-ray Optics. Grenoble: ESRF, 1987. P. 54.
- [3] *Bonnelle C., Mande C.* // Advances in x-ray spectroscopy. Oxford and New York: Pergamon Press, 1982. P. 423.
- [4] *Wittry D.B., Sun S.J.* // Appl. Phys. 1990. V. 67. P. 1633–1638.
- [5] *Wittry D.B., Sun S.J.* // Appl. Phys. 1990. V. 68. P. 387–391.
- [6] *Marcelli A., Soldatov A., Mazuritsky M.* // European. Patent N 97830282. 6–2208.
- [7] *Marcelli A., Soldatov A., Mazuritsky M.* // Japanese Patent N 339427/97.
- [8] *Marcelli A., Mazuritsky M., Soldatov A.* // Crystal and Multilayer Optics/ Ed. by A. Macrander, A Freund, T. Ishikawa. V. 3448. San Diego. SPIE. 1998.