01;07

Моделирование ступенчатой поверхности рентгеновского дифрактора высокого разрешения

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

Ростовский государственный университет

Поступило в Редакцию 18 января 2000 г.

Проведен систематический анализ трех возможных схем построения ступенчатого рентгеновского дифрактора высокого разрешения. В первой схеме все ступени имеют одинаковую угловую ширину, во второй схеме все ступени имеют одинаковую высоту — расстояние от края одной ступени до начала другой. В третьей схеме используется симметричный способ построения ступенек. В этом случае расстояние от края одной ступеньки до окружности фокусировки равно расстоянию от окружности фокусировки до начала следующей ступеньки. Показано, что наиболее устойчивые характеристики имеют первая и третья схемы.

Для разложения рентгеновского излучения в спектр с одновременной фокусировкой используются изогнутые (цилиндрические или сферические) совершенные кристаллы [1–3]. Методы, использующие цилиндрически изогнутый кристалл, были впервые рассмотрены достаточно давно [4–8]. Для излучения, генерируемого в малом объеме, т.е. точечного источника, фокусирующие методы позволяют получать высокое спектральное разрешение. Под разрешающей силой принято понимать безразмерную величину отношения $E/\Delta E$ или $\lambda/\Delta\lambda$, где E — энергия рентгеновского кванта, а λ — длина волны излучения. Если θ — угол Брегга между падающим лучом и соответствующей атомной плоскостью кристалла, то из закона Брегга следует, что допустимая величина варьирования угла Брегга $\Delta\theta$ определяет разрешение $\lambda/\Delta\lambda = \operatorname{tg}\theta/\Delta\theta$ и зависит от следующих факторов: мозаичного несовершенства используемого кристалла, метода разложения рентгеновского излучения в спектр, размера отражающей брегговской поверхности кристалла — дифрактора. Под брегговской (дифракционной) зоной отражения понимают совокупность точек кристаллографической поверхности, для которых при заданном интервале значений длин волн $\lambda - \Delta\lambda \leqslant \lambda \leqslant \lambda + \Delta\lambda$ угол Брегга находится в пределах $\theta - \Delta\theta \leqslant \theta \leqslant \theta + \Delta\theta$.

Чем больше величина $\Delta\theta$, тем больше площадь дифракционной зоны и, как следствие, больше величина апертуры и соответственно выше интенсивность получаемых спектров. Однако обычно желательно обеспечить одновременно с высокой интенсивностью и высокое спектральное разрешение (ассоциируемое с малой отражающей площадью кристалла). Оба условия могут быть выполнены в случае использования нескольких кристаллов. Ряд работ [9–11] посвящен принципам создания ступенчатого дифрактора, каждая ступень которого представляет собой отдельный изогнутый кристалл. В работе [10] впервые предложен вариант светосильного псевдосферического ступенчатого рентгеновского дифрактора, удовлетворяющего условию высокого спектрального разрешения. Последнее условие достигается при постоянной угловой ширине ($\Delta\varphi = \text{const}$) для каждой из ступенек. Нами [12,13] был разработан алгоритм компьютерного моделирования дифракционных зон для кристаллов с различной формой кривизны поверхности (цилиндрической, эллипсоидальной, тороидальной и т. д.). В настоящей работе проведены систематический анализ возможных моделей ступенчатых рентгеновских дифракторов, позволяющих достичь высокого разрешения в спектроскопии, а также исследование зависимости максимальной апертуры от разрешающей способности дифрактора.

На рис. 1, *a* изображен псевдосферический ступенчатый дифрактор, аналогичный тому, что предложен нами в [10,11], а также оптическая схема соответствующего фокусирующего спектрометра. На рис. 1, *b* схематично показано сечение этого дифрактора плоскостью круга фокусировки с центром в точке O'. Окружность фокусировки, рсположенная в горизонтальной плоскости, проходит через точку S, где находится источник излучения, точку A_0 — вершину дифрактора (середину центральной ступеньки) и точку I — место положения детектора. Сечение каждой ступеньки плоскостью круга фокусировки представляет собой дугу окружности радиуса $R_i = OA_i(R_i = R_{-i})$, причем $A_iB_i = A_iD_i$, где $i = -N, -(N-1), \dots 0, \dots N-1, N$. Введем обозначения:

$$\alpha_i = \angle A_0OA_i, \quad \beta_i = \angle A_0OB_i, \quad \Delta\varphi_i = |\beta_i - \alpha_i|,$$
$$\Delta\theta_i = \angle A_iSB_i, \quad \omega = \angle B_{-N}OB_N. \tag{1}$$

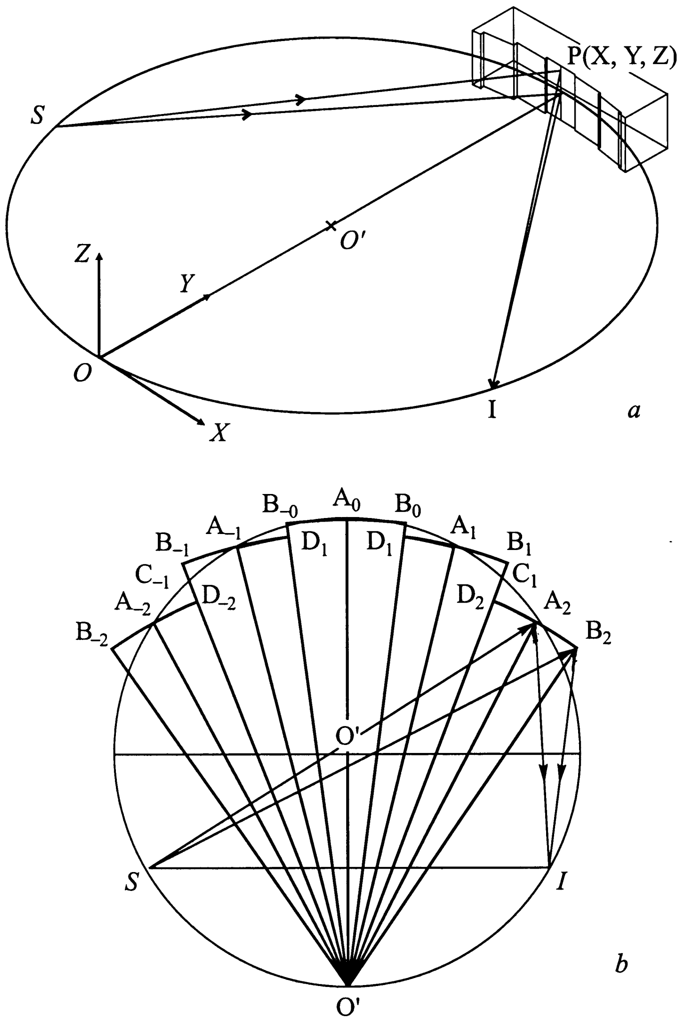

Рис. 1. Рентгено-оптическая схема фокусировки и разложения в спектр излучения. XYZ-системы отсчета; O', O — центры круга фокусировки и кривизны ступенек соответственно; S, I — положение источника излучения и его изображения.

Угол α_i определяет положение центра, $|\beta_i - \alpha_i|$ — угловую полуширину i-й ступеньки на окружности фокусировки, ω-полную угловую ширину дифрактора.

Очевидно, что в центр каждой ступеньки излучение падает под одним и тем же углом к касательной. Именно этот угол называют углом Брегга θ. Обозначим через $\pm\Delta\theta_i$ диапазон варьирования угла Брегга, обусловленный конечной угловой полушириной $\Delta\varphi_i$ i-й ступеньки. В спектроскопии значение $\Delta\theta_i$ не превышает 10^{-2} rad. Легко записать приближенную формулу, связывающую эти величины.

$$\Delta\varphi_i \approx \frac{\operatorname{tg}\theta + \operatorname{tg}\alpha_i}{\operatorname{tg}\theta}\Delta\theta_i = \left[1 + \frac{\operatorname{tg}\alpha_i}{\operatorname{tg}\theta}\right]\Delta\theta_i. \tag{2}$$

Наибольшее значение $\Delta\theta_i$ задает величину спектрального разрешения дифрактора. Рассмотрим три модели построения ступенчатого дифрактора и сравним их с точки зрения предельно возможной апертуры и спектральной разрешающей силы.

В первой модели, предложенной нами в работе [10], используются ступени одинаковой угловой ширины, т. е. $\Delta\varphi_i = \mathrm{const}(i)$. Угол ω с вершиной в точке O разбивается на $2N+1$ равных частей (рис. 1, b). Полуширина каждой ступеньки определяется из равенства (3):

$$\Delta\varphi_i = \frac{\omega}{2(2N+1)}. \tag{3}$$

Полная апертура дифрактора (и соответственно интегральный выход излучения) равна сумме апертур отдельных ступенек. Середина каждой из них, лежащая на окружности фокусировки, определяется углом α_i и радиусом R_i в полярных координатах с центром в точке O:

$$\alpha_i = \frac{\omega \times i}{2N+1}, \qquad R_i = R_0 \cos\alpha_i. \tag{4}$$

Угол θ определяется положением точки S на окружности. Соответствующий максимально возможный размер ω ступенчатого дифрактора не может превышать величину 2θ. Обозначим через H высоту дифрактора вдоль оси Z, $L_i = D_iB_i$. Апертуру каждой ступеньки можно представить в виде

$$\Omega_i = \frac{H \times L_i}{SA_i^2}\sin\theta. \tag{5}$$

Тогда полная апертура дифрактора, имеющего $(2N+1)$-ступеней, определяется уравнением:

$$\Omega = \frac{\omega \times H \sin\theta}{R_0(2N+1)} \sum_{i=-N}^{i=N} \frac{\cos\alpha_i}{\sin^2(\theta+\alpha_i)}. \tag{6}$$

В пределе (при $E/\Delta E \to \infty$) имеет место следующий определенный интеграл:

$$\Omega = \frac{H\sin\theta}{R_0} \int\limits_{-\omega/2}^{\omega/2} \frac{\cos\alpha}{\sin^2(\theta+\alpha)} d\alpha$$

$$= \frac{H\sin\theta}{R_0} \left[\frac{\cos\theta}{\sin(\theta+\alpha)} + \frac{\sin\theta}{2} \ln\left(\frac{1+\cos(\theta+\alpha)}{1-\cos(\theta+\alpha)} \right) \right]_{\omega/2}^{-\omega/2}. \tag{7}$$

Расчеты показывают, что значения апертур, полученные по формулам (6) и (7), точно совпадают.

Во второй модели, предложенной в работе [9], рассматривается постоянной величина шага между ступеньками $st = R_i - R_{i+l}$. Для $i > 0$ принятых нами обозначениях получаются следующие выражения для углов:

$$\alpha_i = \arccos(1 - i(st/R_0)), \tag{8}$$

$$\Delta\varphi_i = \arccos(1 - i(st/R_0))$$

$$- 2 \sum_{k=1}^{k=i-1} (-1)^k \arccos(1 - k(st/R_0)) + (-1)^i \beta_0. \tag{9}$$

При некоторых значениях параметров st и β_0 величина $\Delta\varphi_i$ (на i-м шаге построения) может получиться отрицательной. Из рис. 1, *b* видно, что такое решение невозможно. Из геометрических соображений $\Delta\varphi = \beta_i - \alpha_i$ и $\beta_i > \alpha_i$. Таким образом, построение дифрактора в рамках этой модели для произвольной величины разрешающей силы невозможно, поскольку последняя определяется параметром β_0.

Рассмотрим еще один (третий, "симметричный") вариант ступенчатого дифрактора. Его принцип построения состоит в следующем. Полуширина нулевой ступеньки ограничена $\Delta\varphi_0 \leqslant \Delta\theta = (\Delta\lambda/\lambda)\,\mathrm{tg}\,\theta$.

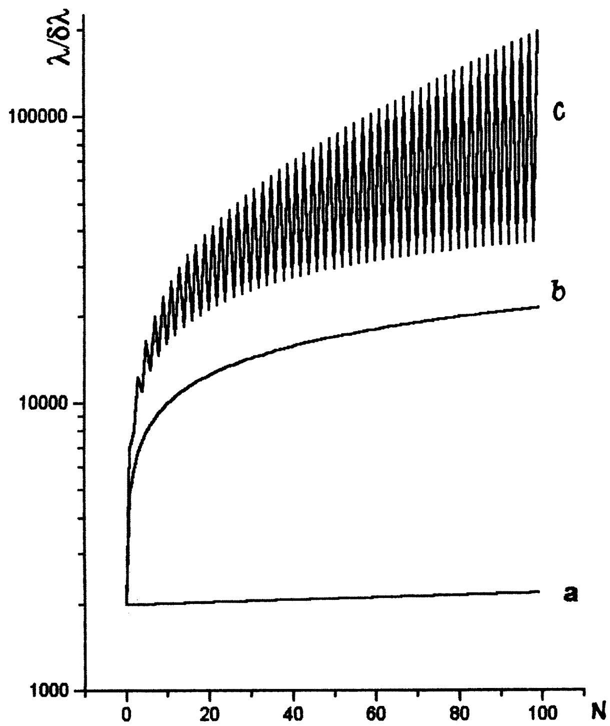

Рис. 2. Графики зависимостей разрешающей силы $\lambda/\Delta\lambda$ от номера N ступеньки для различных моделей рентгеновского дифрактора: a — $\Delta\varphi$–const; b — симметричная модель; c — st–const.

Начальные значения углов $\alpha_0 = 0$, $\beta_0 = \Delta\varphi_0$. Требуется, чтобы $B_iC_i = C_iD_{i+1}$ и соответственно $D_iA_i = A_iB_i$. Два уравнения определяют связь между углами

$$\cos\alpha_{i+1} = 2\cos\beta_i - \cos\alpha_i, \qquad \beta_{i+1} = 2\alpha_{i+1} - \beta_i. \tag{10}$$

Легко доказать, что при этом варианте построения дифрактора $\Delta\varphi_{i+1} < \Delta\varphi_i$, т.е. спекральное разрешение для каждой последующей ступени выше, чем для предыдущей. Следовательно, полное разрешение определяется только разрешением центральной ступени и не уменьшается при увеличении числа ступеней. Поэтому в данной модели увеличиение числа ступенек приводит к увеличению спектрального выхода без ухудшения разрешения. Таким образом, выполняется условие $\Delta\varphi_i < \Delta\theta$, что и обспечивает для всего дифрактора заданное разрешение. При этом общее количество ступенек определяется условием $|\beta_N| \leqslant \omega/2$. В этой модели апертура дифрактора может быть рассчитана следующим образом:

$$\Omega = \frac{H \sin\theta}{R_0}\left[\Delta\varphi_0 + 2\sum_{i=1}^{i=N}\frac{(\beta_i - \alpha_i)\cos\alpha_i}{\sin^2(\theta + \alpha_i)}\right]. \tag{11}$$

На рис. 2 изображены значения разрешающей силы для каждой ступеньки дифрактора. В любой модели общая для всего дифрактора разрешающая сила равна наименьшему из всех значений. Расчеты проведены для $R_0 = 320\,\text{mm}$, $\theta = 60^\circ$. Очевидно, что для реального дифрактора, содержащего 3–5 ступенек, различия между моделями представляются мало существенными. Однако в первой ($\Delta\varphi$ – const) и третьей (симметричный вариант) моделях для любой сколь угодно близкой к предельной величине, определяемой спектральными свойствами (кривой качания) используемого кристалла, можно выполнить построение ступенчатой поверхности дифрактора и при этом достичь максимально возможной апертуры. В то же время для модели *st* – const такое построение возможно не всегда. При фиксированном параметре β_0 величина *st* должна попадать в интервал, составляющий примерно 1% от абсолютного значения, которое обеспечивает $\Delta\varphi_i > 0$. За пределами этого интервала построение прекращается уже на первых ступеньках. Таким образом, наиболее стабильными являются модели первая и третья.

Список литературы

[1] *Bonnelle C., Mande C.* Advances in *x*-ray spectroscopy. Oxford and New York: Pergamon Press, 1982. 423 p.
[2] *Freund A.K.* *X*-ray Optics. Grenoble: ESRF, 1987. 54 p.
[3] *Michette A.G.* Optical System for Soft *X* ray. New York: Plenum Press, 1986. 351 p.
[4] *DuMond J.W.M., Kirpatrick A.* // Rev. Sci. Instrum. 1930. V. 1. P. 88.
[5] *Johann H.H.* // Z. Phys. 1931. V. 69. P. 185.

[6] *Cauchois Y.* // Phys. Radium. 1932. V. 3. P. 320.
[7] *Von Hamos I.* // Naturwiss. 1932. V. 20. P. 705.
[8] *Johannson T.* // Z. Phys. 1933. V. 82. P. 507.
[9] *Wittry D.B., Sun S.J.* // Appl. Phys. 1991. V. 69. N 7. P. 3886–3892.
[10] *Marcelli A., Soldatov A.V., Mazuritsky M.I.* European Patent Nr. 97830282.6–2208, deposited by INFN on 06/11/97, published on 12/16/98.
[11] *Marcelli A., Mazuritsky M.I., Soldatov A.V.* // SPIE prosceedings. Wash. 1998. V. 3448. P. 210–217.
[12] *Мазурицкий М.И., Солдатов А.В., Латуш Е.М.* и др. // Письма в ЖТФ. 1999. Т. 25. В. 19. С. 11–16.
[13] *Рабочий вариант* программы, написанной среде DELPHI, можно найти в Интернете по адресу http://www.projectx. aaanet.ru