01;07

Фокусирующий рентгеновский дифрактор: влияние параметров изгиба кристалла на спектральное разрешение

© Е.М. Латуш, М.И. Мазурицкий

Ростовский государственный университет, Ростов-на-Дону
E-mail:mazurmik@icomm.ru

Поступило в Редакцию 4 сентября 2001 г.

В приближении точечного источника излучения проведено теоретическое исследование зависимости спектрального разрешения фокусирующего рентгеновского дифрактора от формы и кривизны кристаллографических поверхностей в плоскости, перпендикулярной плоскости круга фокусировки. Для эллипсоидального и тороидального типов изгиба кристалла получены значения параметров кривизны, при которых достигается наилучшее спектральное разрешение.

Для монохроматизации рентгеновского излучения используются совершенные и мозаичные кристаллы (кварц, кремний, германий, слюда, графит и др.). Традиционные кристалл-дифракционные методы разработаны и описаны достаточно полно [1–4]. Под параметром разрешения принято понимать безразмерную величину отношения $\Delta E/E$ или $\Delta\lambda/\lambda$, где E — энергия кванта рентгеновского излучения (λ — соответствующая длина волны). Если θ — угол Брэгга между падающим лучом и касательной к соответствующей кристаллографической плоскости, то из закона Брэгга следует, что допустимая величина варьирования угла Брэгга $\Delta\theta$ определяет спектральное разрешение следующим образом:

$$\Delta\lambda/\lambda = \Delta\theta/\operatorname{tg}\theta \qquad (1)$$

и зависит главным образом от ниже перечисленных факторов: мозаичного несовершенства используемого кристалла, метода разложения рентгеновского излучения в спектр, размера отражающей брэгговской поверхности кристалла — дифрактора.

В настоящее время для монохроматизации рентгеновского излучения используют отражение от плоских или изогнутых кристаллов. Последние применяются для точечных источников излучения (размеры

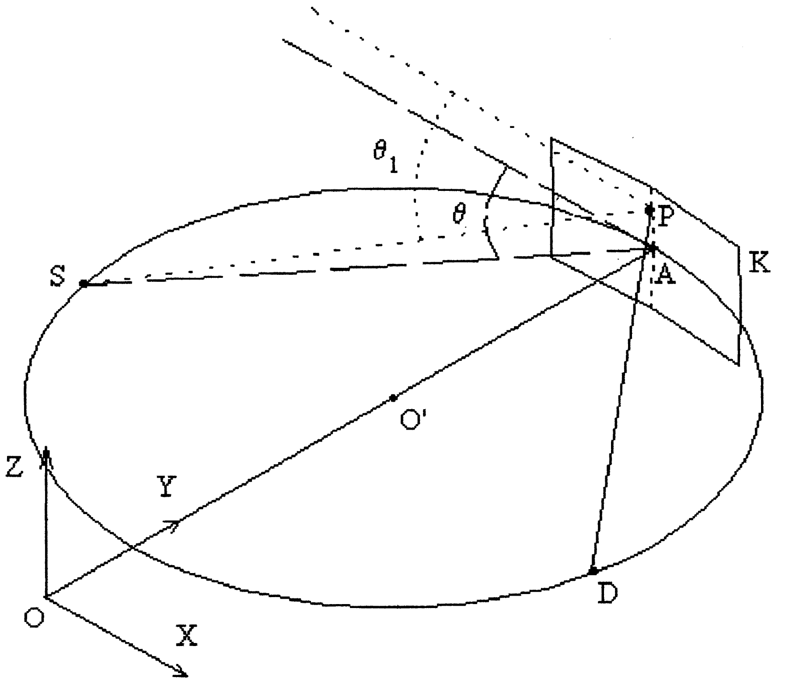

Схема расположения на круге фокусировки источника излучения S и изогнутого кристалла K.

которых, как правило, не превышают значения радиуса кривизны, умноженного на $\Delta\lambda/\lambda$) и позволяют обеспечивать фокусировку лучей заданной длины волны в приемное окно детектора. В работе [5] нами описан алгоритм и результаты компьютерного моделирования формы брэгговских зон на поверхности изогнутого кристалла.

Исследуем зависимость спектрального разрешения от кривизны изгиба кристалла в плоскости, перпендикулярной плоскости фокального круга. На рисунке изображена схема расположения источника излучения S и изогнутого кристалла-дифрактора K. XYZ — система координат. O', O — центры круга фокусировки и кривизны кристалла в плоскости YOZ соответственно. Обозначим через r отрезок $O'A$ — радиус круга фокусировки. Окружность фокусировки, расположенная в плоскости XOY, проходит через точку S, где находится источник излучения, точку A — вершину дифрактора и точку D — местоположение детектора.

Рассмотрим тороидальный и эллипсоидальный типы изгибов кристалла. Цилиндрический и сферический изгибы могут рассматриваться, как частные случаи эллипсоидального. Плоскости XOY и YOZ являются плоскостями симметрии кристалла. Для любой точки P, лежащей на поверхности кристалла в плоскости YOZ (отличной от точки A — вершины дифрактора), угол θ_1 отличается от угла θ. То есть при рассмотрении брэгговской дифракции в плоскости YOZ излучение падает из точки S под несколько другим углом к касательной в точке P, чем в центре изогнутого кристалла. Очевидно также, что углы θ_1 и θ отличаются тем больше, чем дальше точка P расположена от вершины кристалла. Таким образом, величина отличия угла дифракции θ_1 от истинного угла Брэгга θ равна $\Delta\theta = \theta_1 - \theta$ и зависит от z — координаты точки P. Значение $\Delta\theta$ для фиксированного z, в свою очередь, зависит от кривизны кристалла в плоскости YOZ. Обозначим через b — радиус кривизны кристалла в плоскости YOZ для тороидального изгиба или величину соответствующей полуоси для случая эллипсоида вращения. Исследуем поведение функции $\Delta\theta(b)$ на множестве $b \in (0, \infty)$ при фиксированном значении $z \neq 40$. (При $z = 0$ $\theta_1 = \theta$ и функция $\Delta\theta(b)$ обращается в нуль).

Рассмотрим тороидальный тип изгиба кристалла-дифрактора. Покажем, что функция $\Delta\theta(b)$ при $z \neq 0$ на множестве значений $b \in (0, \infty)$ обращается в нуль в точках $2r$ и $2r\sin^2\theta$. Сечение кристалла плоскостью YOZ представляет собой дугу окружности с центром в точке O, радиуса $OA = b$. Таким образом, в плоскости YOZ уравнение тора имеет вид: $y^2 + z^2 = b^2$.

Известно, что для дифракторов, применяемых в рентгеновской спектроскопии, значение $|z/b| \leqslant 10^{-2}$, т. е. малая величина. Приближенно, с точностью до членов второго порядка малости можем представить выражение $y = \sqrt{b^2 - z^2} = b\sqrt{1 - z^2/b^2}$ в виде $y \approx b - z^2/(2b)$. Используя координаты точек P, O, S и учитывая полученное приближенное выражение, легко получить выражения для векторов $\mathbf{PS}$ и $\mathbf{n}$ (нормаль к атомной плоскости кристалла в точке P)

$$\mathbf{PS} \approx -2r\sin\theta\cos\theta \cdot \mathbf{i} + \left(\frac{z^2}{2b} - 2r\sin^2\theta\right) \cdot \mathbf{j} - z \cdot \mathbf{k};$$

$$\mathbf{n} \approx \mathbf{PO} = \left(\frac{z^2}{2b} - b\right) \cdot \mathbf{j} - z \cdot \mathbf{k}. \qquad (2)$$

Найдем $\sin\theta_1$ через скалярное произведение векторов **PS** и **n**:

$$\sin\theta_1 = \cos(90 - \theta_1) = \frac{(\mathbf{n}\cdot\mathbf{PS})}{|\mathbf{n}|\cdot|\mathbf{PS}|}, \tag{3}$$

$\Delta\theta = \theta_1 - \theta \approx \sin\theta_1 - \sin\theta$, тогда, используя (2), (3), получим приближенное выражение

$$\Delta\theta \approx -\frac{z^2}{b^2}\cdot\frac{1 - 2(r/b)(1+\sin^2\theta) + 4(r/b)^2\sin^2\theta}{8(r/b)^2\sin\theta + (z/b)^2(1/\sin\theta - 2(r/b)\sin\theta)}. \tag{4}$$

Рассмотрим выражение (4). Функция обращается в нуль, когда числитель дроби в нуль обращается. Корнями квадратного уравнения $b^2 - 2r(1+\sin^2\theta)b + 4r^2\sin^2\theta = 0$ являются:

$$\{b = 2r; \quad b = 2r\sin^2\theta\}. \tag{5}$$

Для найденных значений b знаменатель дроби не обращается в нуль, поскольку $\theta \in [20^\circ, 60^\circ]$, а $r \gg |z|$.

Очевидно, что минимальное значение $|\Delta\theta|$ для тороидального изгиба достигается при условии (5). Поскольку $\Delta\theta$ определяет спектральное разрешение (1) дифрактора, то для произвольной точки $P(0, y, z)$, лежащей в плоскости YOZ, наилучшее спектральное разрешение достигается именно при условии (5).

Известно, что в плоскости круга фокусировки следует использовать значение радиуса кривизны, равное $2r$, полагая его оптимальным для достижения наилучшего спектрального разрешения. Тогда в соответствии с условием (5) для тора соотношение радиусов кривизны в плоскости XOY и YOZ (R_H и R_V соответственно) определяется следующим образом:

$$\frac{R_V}{R_H} = \begin{cases} 1 \ \ (\text{сфера}) \\ \sin^2\theta. \end{cases} \tag{6}$$

Рассмотрим эллипсоидальный тип изгиба кристалла-дифрактора. Покажем, что функция $\Delta\theta(b)$ при $z \neq 0$ на множестве значений $b \in (0, \infty)$ обращается в нуль в точках $\sqrt{2ra}$ и $\sqrt{2ra}\sin\theta$. Сечение кристалла плоскостью YOZ представляет собой дугу эллипса с центром в точке O, с полуосями a и b (вдоль оси Y и Z соответственно). Таким образом, в плоскости YOZ уравнение эллипсоида имеет вид: $y^2/a^2 + z^2/b^2 = 1$.

Аналогично рассуждениям, приведенным для случая тороидального изгиба, можем приближенно представить выражение $y = a\sqrt{1 - z^2/b^2}$ в виде $y \approx a - (z^2 a)/(2b^2)$. Используя координаты точек P, O, S и учитывая полученное приближенное выражение, можно получить выражения для векторов **PS** и **n**:

$$\mathbf{PS} \approx -2r \sin\theta \cos\theta \cdot \mathbf{i} + \left(\frac{z^2 a}{2b^2} - 2r \sin^2\theta\right) \cdot \mathbf{j} - z \cdot \mathbf{k};$$

$$\mathbf{n} \approx \left(\frac{z^2 a}{2b^2} - a\right) \cdot \mathbf{j} - \frac{a^2}{b^2} z \cdot \mathbf{k}. \tag{7}$$

Найдем $\sin\theta_1$ аналогично тороидальному изгибу по формуле (3). $\Delta\theta = \theta_1 - \theta \approx \sin\theta_1 - \sin\theta$, тогда, используя (3), (7), получим приближенное выражение:

$$\Delta\theta \approx -\frac{z^2}{b^2} \times \frac{1 - 2(ra/b^2)(1 + \sin^2\theta) + 4(ra/b^2)^2 \sin^2\theta}{\big(1 + (z/b)^2(a^2/b^2 - 1)/2\big) \times \big(8(r/b)^2 \sin\theta + (z/b)^2(1/\sin\theta - (2ra/b^2)\sin\theta)\big)}. \tag{8}$$

Рассмотрим выражение (8). Функция обращается в нуль, когда числитель дроби принимает нулевые значения. Корнями биквадратного уравнения $b^4 - 2ra(1 + \sin^2\theta)b^2 + 4r^2a^2\sin^2\theta = 0$ являются: $\{b^2 = 2ra; b^2 = 2ra\sin^2\theta\}$; поскольку $b > 0$, то

$$\left\{b = \sqrt{2ra}; \quad b = \sqrt{2ra}\sin\theta\right\}. \tag{9}$$

Для найденных значений b знаменатель дроби в нуль не обращается, так как $r \gg |z|$, а угол Брэгга $\theta \in [20^\circ, 60^\circ]$. Очевидно также, что минимальное значение $|\Delta\theta|$ для эллипсоидального изгиба достигается при условии (9). Поскольку $\Delta\theta$ определяет спектральное разрешение (1) дифрактора, то для произвольной точки $P(0, y, z)$, лежащей в плоскости YOZ, наилучшее спектральное разрешение достигается именно при условии (9).

Поскольку сечение эллипсоида плоскостью XOY представляет собой дугу окружности с центром в точке O, радиусом $2r$ ($a = 2r$, так как это значение радиуса кривизны в плоскости круга фокусировки), постольку в соответствии с условием (9) для эллипсоида оптимальное соотношение значений его полуосей в плоскости XOY и YOZ определяется следующим образом:

$$\frac{b}{a} = \begin{cases} 1 & (\text{сфера}) \\ \sin\theta. \end{cases} \tag{10}$$

Список литературы

[1] *Freund A.K.* X-ray Optics. Grenoble: ESRF, 1987. 54.
[2] *Bonnelle C., Mande C.* Advances in x-ray spectroscopy. Oxford and New York: Pergamon Press, 1982. 423.
[3] *DuMond J.W.M., Kirpatrick A.* // Rev. Sci. Instrum. 1930. V. 1. P. 88.
[4] *Johann H.H.* // Z. Phys. 1931. V. 69. P. 185.
[5] *Мазурицкий М.И., Солдатов А.В., Латуш Е.М., Ляшенко В.Л., Марчелли А.* // Письма в ЖТФ. 1999. Т. 25. В. 19. С. 11–16.