

01;07

Фрактальные свойства геометрической модели рентгеновского дифрактора высокого разрешения

© Е.М. Латуш, М.И. Мазурицкий

Ростовский государственный университет

E-mail: mazurmik@icomm.ru

Поступило в Редакцию 9 апреля 2001 г.

Известно, что совершенные и мозаичные кристаллы используются для монохроматизации рентгеновского излучения в диапазоне энергий от нескольких сотен до десятков тысяч электрон-вольт. Для непараллельных лучей применяется фокусирующая рентгеновская оптика на основе цилиндрически изогнутых кристаллов [1–3] (методы Иоганна, Иоганссона, Кошуа) или кристаллов со сферической, тороидальной [4] формой изгиба кристаллографических плоскостей. Специальные модели ступенчатых дифракторов высокого разрешения были предложены [5–8] для исследования возможности точной фокусировки монохроматического излучения. В настоящей работе рассмотрены фрактальные свойства геометрической модели ступенчатого дифрактора высокого разрешения.

Основная специфика фокусирующих методов состоит в дифракционном отражении и одновременной фокусировке лучей большой поверхностью изогнутого монокристалла. Ряд проблем, решаемых с использованием рентгеноспектрального метода, требуют высокой разрешающей способности спектрометра в сочетании с достаточной светосилой. Разрешающая способность тем выше, чем меньше значение параметра разрешения, являющегося безразмерной величиной $\Delta\lambda/\lambda$ ($\Delta E/E$), где λ — длина волны излучения (E — соответствующее значение энергии). Если θ — угол между падающим лучом и соответствующей атомной плоскостью кристалла, то из закона Бреггов следует, что допустимая величина варьирования угла определяется соотношением $\Delta\theta = \text{tg}\theta(\Delta\lambda/\lambda)$ и зависит от следующих факторов: мозаичного несовершенства используемого кристалла, метода разложения рентгеновского излучения в спектр, размера отражающей брегговской поверхности (дифракционной зоны) кристалла-дифрактора. Дифракционная

зона отражения является совокупностью точек кристаллографической поверхности, для которых при заданном интервале значений длин волн $\lambda - \Delta\lambda \leq \lambda \leq \lambda + \Delta\lambda$ угол Брегга находится в пределах $\theta - \Delta\theta \leq \theta \leq \theta + \Delta\theta$. В работе [9] нами рассмотрен алгоритм, составлена программа компьютерного моделирования дифракционных зон для изогнутых кристаллов-монокроматоров с различной формой кривизны кристаллографических плоскостей (цилиндрической, сферической, тороидальной и т.д.), применяемых в схемах фокусировки на круге Роуанда.

Чем больше величина $\Delta\theta$, тем шире дифракционная зона и, как следствие, больше величина апертуры и соответственно интенсивности регистрируемых спектров. Однако часто требуется обеспечить одновременно высокую интенсивность и хорошее спектральное разрешение (ассоциируемое с малой отражающей площадью кристалла). Оба условия могут быть выполнены лишь в случае использования сразу нескольких кристаллов.

Ряд работ [5–7] посвящен принципам создания ступенчатого дифрактора, каждая ступень которого представляет собой отдельный изогнутый кристалл. В работе [8] рассмотрена теоретическая схема построения, проведен систематический анализ возможных моделей светосильного ступенчатого рентгеновского дифрактора, удовлетворяющего условию заданного спектрального разрешения. Показано, что при неизменной угловой ширине ($\Delta\varphi = \text{const}$) каждой из ступенек достигается высокое разрешение.

В работах [10,11] были представлены результаты тестирования действующего прототипа светосильного ступенчатого дифрактора, изготовленного на основе четырех цилиндрически изогнутых кристаллов слюды (002), для рентгеновского микроанализа. Тестирование, проведенное в спектрометрическом канале микроанализатора САМЕВАХ-*micro* с использованием излучения $\text{AgL}\alpha(3)$, показало, что при значении 10^{-3} параметра разрешения интенсивность спектра возросла в 3.3 раза по сравнению с соответствующей схемой для одного изогнутого кристалла.

Отражающая поверхность рентгеновского ступенчатого дифрактора состоит из одинаковых по высоте вогнутых цилиндрических фрагментов, имеющих общую вертикальную ось. На каждой ступеньке закреплен (наклеен или установлен на оптическом контакте) изогнутый кристалл-монокроматор. На рис. 1, *a* схематично показано среднее сечение такого дифрактора плоскостью круга фокусировки с центром в точке O' .

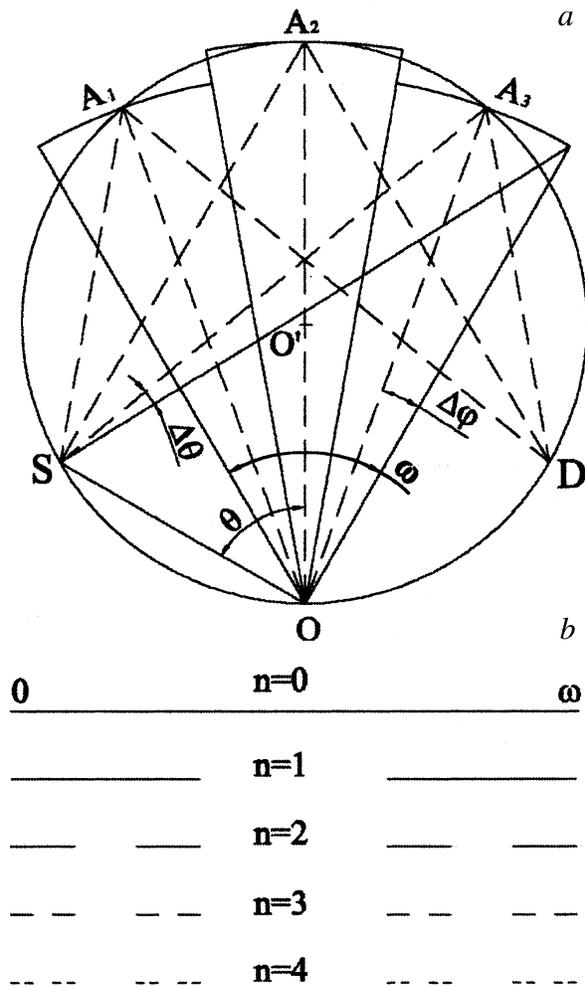


Рис. 1. *a* — оптическая схема ступенчатого дифрактора и разложения в спектр рентгеновского излучения. O', O — центры круга фокусировки и кривизны ступенек соответственно; S, D — положение источника излучения и его изображения. *b* — построение триадного канторовского множества. Затравка — отрезок $[0, \omega]$. Образующий элемент удаляет среднюю треть. На рисунке показаны первые четыре поколения.

Окружность фокусировки, расположенная в горизонтальной плоскости, проходит через точку S , где находится источник излучения, точку A_2 — вершину дифрактора (середицу центральной ступеньки) и точку D — место положения детектора. Сечение каждой ступеньки плоскостью круга фокусировки представляет собой дугу окружности с центром в точке O . Радиус центральной ступеньки равен удвоенному радиусу круга фокусировки. Радиусы последующих ступенек уменьшаются по мере удаления их от центра.

Угол ω определяет полную угловую ширину дифрактора относительно точки O , $\alpha_i = \angle A_2OA_i$ и $R_i = OA_i$ — положение центра i -й ступеньки и радиус ее кривизны. Излучение падает в центр каждой ступеньки под углом θ к касательной. В одной из моделей, предложенной нами в работе [8], используются ступеньки одинаковой угловой ширины, т.е. $2\Delta\varphi = \text{const}(i)$. Угол ω с вершиной в точке O разбивается на $2N$ равных частей, поскольку $\Delta\varphi$ — полуширина каждой ступеньки (рис. 1, a). Очевидно, что

$$\alpha_i = \frac{\omega \times (2i - N - 1)}{2N}, \quad R_i = R_0 \cos \alpha_i, \quad i = 1, 2, \dots, N. \quad (1)$$

Рассмотрим построение ступенчатой поверхности путем утроения на каждом шаге количества ступенек. При этом на время отвлечемся от рассмотрения реального дифрактора и опишем схематично геометрическую модель, аналогичную той, что используется в [12] для создания канторовского фрактального множества точек на единичном отрезке $[0,1]$.

Начальной затравкой при создании исходного множества (так называемым нулевым поколением) служит дуга, расположенная в плоскости фокального круга, которая имеет центр в точке O и угловой размер ω . Процесс размножения ступенек, подобных исходной, состоит в применении определенной процедуры, представляющей собой образующий элемент множества. В данном случае образующий элемент на первом шаге делит дугу на три равные угловые части с образованием трех новых дуг с центрами в точке O и отбрасывает среднюю часть. Затем образующий элемент применяется к каждому из двух оставшихся угловых интервалов и т.д. После бесконечного числа поколений полученное множество представляет собой совокупность непересекающихся мельчайших угловых отрезков, которую называют канторовской пылью (см. [13]).

В нашем случае угловой отрезок $[0, \omega]$ заменяет линейный отрезок $[0, 1]$, т.е. множество K_0 — отрезок $[0, \omega]$ (рис. 1, $b, n = 0$). Делим его на три равные части и, выбросив средний интервал $(1/3, 2/3)$, получим множество K_1 , состоящее из двух отрезков $[0, \omega/3]$ и $[2\omega/3, \omega]$ (рис. 1, $b, n = 1$) и т.д. Продолжая этот процесс, получим убывающую последовательность замкнутых вложенных множеств, причем множество K_n состоит из 2^n отрезков длиной $(\omega/3)^n$. По Хаусдорфу (см. [12, 13]) D -фрактальная размерность этого триадного канторовского множества равна $\ln 2 / \ln 3 = 0.630929\dots$

Однако в рентгеновском спектрометре источник излучения расположен в точке S , которая лишь гипотетически (при $\theta = 90^\circ$) может совпадать с точкой O . Связь величин $\Delta\theta$ и $\Delta\varphi$ определяется следующим выражением:

$$\Delta\theta \approx \operatorname{tg} \theta / (\operatorname{tg} \theta + \operatorname{tg} \alpha) \Delta\varphi. \quad (2)$$

Видно, что для точки S угловой размер ступенек не является постоянной величиной, и в этом смысле изменяются геометрические свойства ступенчатого дифрактора. По схеме, аналогичной той, что использовалась для точки O (рис. 1, b), нами получено для точки S числовое значение D -фрактальной размерности по Хаусдорфу. Для этого была составлена компьютерная программа для IBM PC, с помощью которой угловой отрезок $[0, \omega]$ делился на 3; 9; 27 и т.д. равных частей (путем утроения на каждом шаге), причем соответствующие середины отрезков "выбрасывались". На каждом шаге разбиения по формуле (2) значения $\Delta\varphi_i$ пересчитывались в $\Delta\theta_i$. Согласно [12], в n -м поколении d -мера множества (угловых отрезков) определяется выражением:

$$M_d = \sum_{\Delta\theta_i \in K_n} \Delta\theta_i^d \xrightarrow{2^n \rightarrow \infty} \begin{cases} 0, & d > D, \\ \infty, & d < D. \end{cases} \quad (3)$$

Критическая размерность $d = D$, получающаяся в пределе при неограниченном росте количества угловых отрезков ($2^n \rightarrow \infty$), есть фрактальная размерность, т.е. это такое значение показателя степени d , при котором значение суммы в формуле (3) становится конечной величиной и при этом не стремится к нулю, несмотря на неограниченное возрастание числа ступенек дифрактора. При угловой ширине дифрактора $\omega < 2\theta$ (рис. 2, a) фрактальная размерность D по-прежнему равна 0.630929, т.е. остается такой же, что и в случае рассмотрения модели

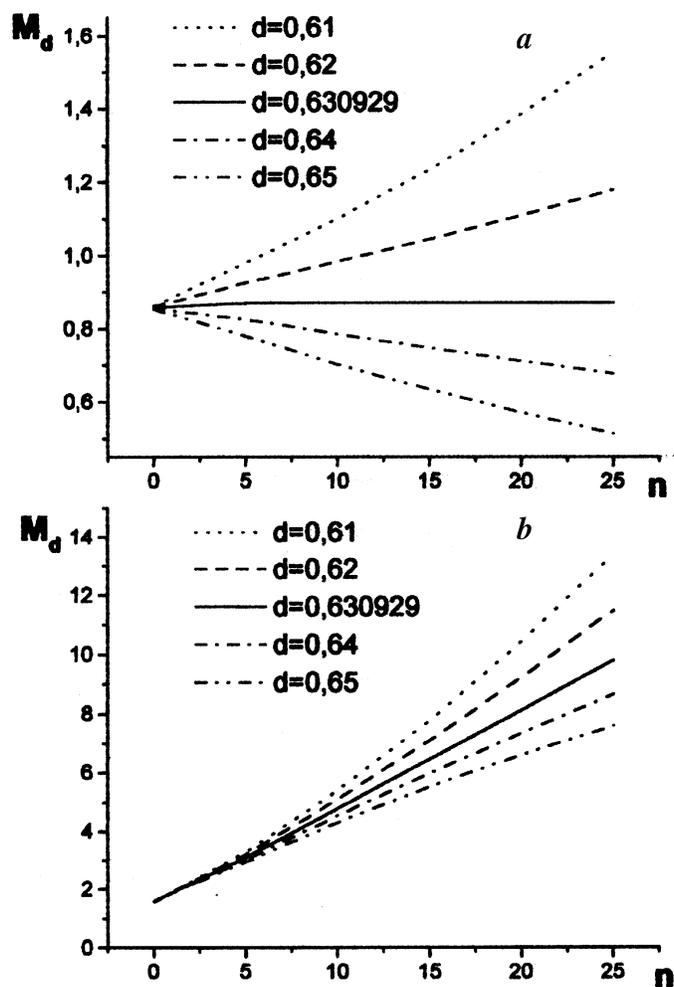


Рис. 2. Графики зависимости d -меры множества угловых отрезков от количества поколений n для различных значений d (количество угловых отрезков в n -м поколении равно 2^n): a — угловая ширина дифрактора $\omega < 2\theta$, b — угловая ширина дифрактора $\omega \approx 2\theta$.

дифрактора из точки O . Это видно из графиков, которые при больших значениях d устремляются к нулю, а при меньших — неограниченно возрастают.

Однако если точка S , где находится источник излучения, оказывается у левой крайней границы дифрактора (т.е. $\theta \approx \omega/2$), то фрактальные свойства геометрической модели исчезают полностью. Численное моделирование показывает, что при любых значениях d графики на рис. 2, b неограниченно возрастают, т.е. в пределе при $2^n \rightarrow \infty$ не существует такой величины $d = D$, при которой значение M_d было бы конечным. Объясняется это просто тем, что для ступенек, близко расположенных к точке S , угловой размер растет, несмотря на уменьшение длины дуги, обусловленное увеличением количества разбиений n .

Список литературы

- [1] *Johann H.H.* // *Z. Phys.* 1931. V. 69. P. 185.
- [2] *Johansson T.* // *Z. Phys.* 1933. V. 82. P. 507.
- [3] *Cauchois Y.* // *J. De Phys. Et Le Radium.* 1932. T. 3. P. 320.
- [4] *Bonnelle C., Mande C.* *Advances in X-Ray Spectroscopy.* Oxford and New York: Pergamon Press, 1982. 423 p.
- [5] *Wittry D.B., Sun S.J.* // *Appl. Phys.* 1991. V. 69. N 7. P. 3886–3892.
- [6] *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.
- [7] *Marcelli A., Mazuritsky M.I., Soldatov A.V.* // *SPIE proceeding.* 1998. V. 3448. P. 210–217.
- [8] *Мазурицкий М.И., Солдатов А.В.* и др. // *Письма в ЖТФ.* 2000. Т. 26. В. 12. С. 15–22.
- [9] *Мазурицкий М.И., Солдатов А.В.* и др. // *Письма в ЖТФ.* 1999. Т. 25. В. 19. С. 11–16.
- [10] *Marcelli A., Mazuritsky M.I., Soldatov A.V., Latush E.M.* Second Workshop, Weimar, Germany, 1999. P. 74–84.
- [11] *Мазурицкий М.И., Солдатов А.В.* и др. // *Письма в ЖТФ.* 2001. Т. 27. В. 1. С. 24–30.
- [12] *Федер Е.* *Фракталы.* М.: Мир, 1991. 260 с.
- [13] *Кроновер Р.Н.* *Фракталы и хаос в динамич. системах.* М.: Постмаркет, 2000. 352 с.