01;07

Зависимость спектрального разрешения рентгеновского дифрактора от формы и кривизны отражающей поверхности

© *Е.М. Латуш, М.И. Мазурицкий*

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

Поступило в Редакцию 30 июля 2001 г.

В приближении точечного источника излучения проведено теоретическое исследование зависимости спектрального разрешения фокусирующего рентгеновского дифрактора от формы кристаллографических поверхностей. Представлена аналитическая зависимость разрешения от кривизны кристалла в плоскости круга фокусировки. Для несимметричного дифрактора получено значение радиуса кривизны, при котором достигается наилучшее спектральное разрешение.

Для монохроматизации рентгеновского излучения используются совершенные и мозаичные кристаллы (кварц, кремний, германий, фтористый литий, 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 атомной плоскости кристалла, то из закона Брэгга следует, что допустимая величина варьирования угла Брэгга $\Delta\theta$ определяет 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. Под брэгговской (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 Брэгга 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 требуется обеспечить одновременно с высокой интенсивностью и высокое спектральное разрешение (ассоциируемое с малым значением параметра спектрального разрешения $\Delta\lambda/\lambda$). Требование высокого спектрального разрешения неизбежно приводит к потере интенсивности спектров. На практике достигается компромисс между этими двумя параметрами.

В настоящее время для монохроматизации рентгеновского излучения используют отражение от плоских или изогнутых кристаллов. Последние применяются для точечных источников излучения (размеры 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 описаны алгоритм и результаты компьютерного моделирования формы брэгговских зон на поверхности изогнутого кристалла.

Исследуем зависимость спектрального разрешения от радиуса изгиба кристалла в плоскости фокального круга. На рис. 1 изображена схема расположения источника излучения S и кристалла-дифрактора K в плоскости круга фокусировки; XOY — система координат; O', O — центры круга фокусировки и кривизны кристалла 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 наиболее распространенные типы изгиба кристалла: цилиндрический, сферический, эллипсоидальный и тороидальный. Сечение кристалла плоскостью XOY представляет собой дугу окружности с центром в точке O, радиусом $OA = R$. Плоскость круга фокусировки является плоскостью симметрии кристалла. Таким образом, на рисунке изображен общий случай сечения кристалла-дифрактора плоскостью круга фокусировки, соответствующий всем перечисленным выше типам изгиба. Видно, что для любой точки P, лежащей на отражающей поверхности кристалла в плоскости круга фокусировки (отличной от точки A — вершины дифрактора), угол θ_1 отличается от угла θ.

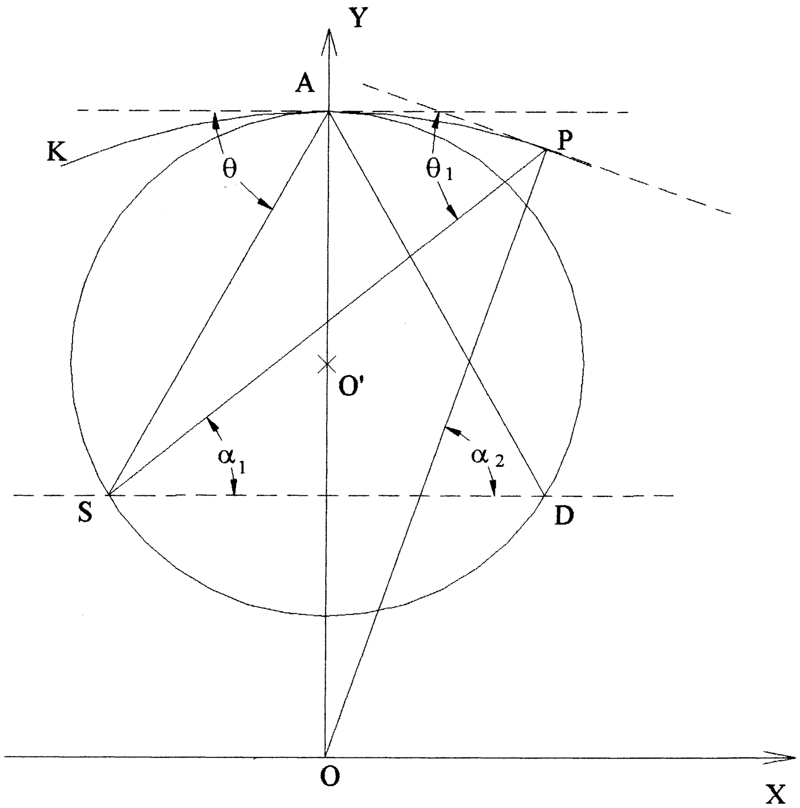

Схема расположения источника излучения S и изогнутого кристалла K в плоскости круга фокусировки.

Иными словами, луч попадает в точку P под несколько другим углом к касательной, чем в точке A. 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 x — абсциссы точки P. Значение $\Delta\theta$ для фиксированного x, в свою очередь, зависит от R — радиуса изгиба кристалла в плоскости XOY.

Исследуем поведение функции $\Delta\theta = F(R)$ на множестве $R \in [r, \infty)$ при фиксированном значении $x \neq 0$. (При $x = 0$ $\theta_1 = \theta$ и функция $F(R) = 0$ для $\forall R$). Покажем, что функция $F(R)$ при $x \neq 0$ является знакопеременной на множестве значений $R \in [r, \infty)$ и принимает единственное нулевое значение в точке этого множества. Обозначим углы наклона прямых PS и PO к оси X через α_1 и α_2 соответственно. Используя координаты точек P, O, S, легко получить выражения для $\operatorname{tg}\alpha_1$ и $\operatorname{tg}\alpha_2$:

$$\operatorname{tg}\alpha_1 = \frac{\sqrt{R^2 - x^2} - R + 2r\sin^2\theta}{x + 2r\sin\theta\cos\theta}, \qquad \operatorname{tg}\alpha_2 = \frac{\sqrt{R^2 - x^2}}{x}. \tag{2}$$

Как видно из рис. 1, $\theta_1 = 90^\circ - (\alpha_2 - \alpha_1)$, тогда

$$\operatorname{tg}\theta_1 = \frac{1 + \operatorname{tg}\alpha_2 \operatorname{tg}\alpha_1}{\operatorname{tg}\alpha_2 - \operatorname{tg}\alpha_1} \text{ и } \operatorname{tg}\Delta\theta = \frac{\operatorname{tg}\theta_1 - \operatorname{tg}\theta}{1 + \operatorname{tg}\theta \operatorname{tg}\theta_1}, \text{ где } \Delta\theta = \theta_1 - \theta. \tag{3}$$

Известно, что для дифракторов, применяемых в рентгеновской спектроскопии, значение $|x/R| \leqslant 10^{-2}$, т.е. малая величина. Приближенно, с точностью до членов второго порядка малости, можем представить выражение $\sqrt{R^2 - x^2} = R\sqrt{1 - (x/R)^2}$ в виде ряда Тейлора и пренебречь членами с x/R в степени большей, чем 2. Получим приближенное выражение

$$\sqrt{R^2 - x^2} \approx R - \frac{x^2}{2R}. \tag{4}$$

Учитывая (2)–(4), запишем:

$$\operatorname{tg}\Delta\theta \approx \frac{x}{R} \cdot \frac{(2r + (x\operatorname{ctg}\theta)/2) - R}{x\operatorname{ctg}\theta + 2r + x^2(R - 2r)/(2R^2)}. \tag{5}$$

Тогда

$$\Delta\theta \approx \operatorname{arctg}\left(\frac{x}{R} \cdot \frac{(2r + (x\operatorname{ctg}\theta)/2) - R}{x\operatorname{ctg}\theta + 2r + x^2(R - 2r)/(2R^2)}\right). \tag{6}$$

Очевидно, что нули функции $\Delta\theta$ совпадают с нулями функции $\operatorname{tg}\Delta\theta$, так как величина $|\Delta\theta| \leqslant 10^{-2}$.

Рассмотрим выражение (5) для $\operatorname{tg}\Delta\theta$. Знаменатель дроби больше нуля для любых значений $R \in [r, \infty)$, поскольку параметры $\theta, r, x/R$ определены на следующих отрезках: $\theta \in [20^\circ, 60^\circ]$, $r \in [100, 1000]$ mm,

$|x/R| \leqslant 10^{-2}$. Функция $F(R)$ при $x \neq 0$ является знакопеременной на полуинтервале $R \in [r, \infty)$ и обращается в ноль, когда числитель дроби обращается в ноль, причем в единственной точке множества $[r, \infty)$ при

$$R = 2r + \frac{x \operatorname{ctg} \theta}{2}. \tag{7}$$

Из выше доказанного следует, что минимальное значение $|\Delta\theta|$ достигается при условии (7). Поскольку $\Delta\theta$ определяет спектральное разрешение дифрактора (1), то для произвольной точки $P(x, y)$, лежащей в плоскости фокального круга, наилучшее спектральное разрешение достигается именно при $R = 2r + (x \operatorname{ctg} \theta)/2$. Однако для разных точек дифрактора координаты x принимают различные значения, следовательно не существует единственного оптимального значения R для всех точек отражающей поверхности. Так как величина $2r \gg (x \operatorname{ctg} \theta)/2$, то на практике обычно используют значение радиуса кривизны в плоскости круга фокусировки $R = 2r$, полагая его наиболее близким к оптимальному.

Иногда встречаются дифракторы, несимметричные относительно плоскости YOZ, проходящей через точку A. Так, например, в серийно выпускаемом рентгеновском микроанализаторе Camebax-Micro (производство фирмы CAMECA, Франция) ширина дифрактора справа от точки A — 37 mm, а слева — 23 mm. В этом случае для получения минимального параметра спектрального разрешения берут значение R, отличное от $2r$. Подставив в формулу (7) $\theta = 30^\circ$, $r = 160$ mm, $x = 37$ mm и $x = -23$ mm, получим выражения для правой и левой частей соответственно: $\Delta\theta_R$ и $\Delta\theta_L$. Решая уравнение $\Delta\theta_R = \Delta\theta_L$, получим оптимальное значение $R \approx 328$ mm, больше чем $2r = 320$ mm.

Список литературы

[1] *Freund A.K.* *X*-ray Optics. Grenoble: ESRF, 1987. P. 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.