01;07

К теории фокусирующего спектрометра Иоганна

© Т. Чен

Московская государственная академия тонкой химической технологии им. М.В. Ломоносова
E-mail: docent65@mtu-net.ru, ttchen@e-mail.ru

Поступило в Редакцию 17 сентября 2001 г.

На основе динамической теории брэгговской дифракции рентгеновского излучения в толстых кристаллах рассмотрена фокусировка сферической волны в схеме Иоганна. С учетом аберрации дифрагированного пучка получены два аналитических выражения для интенсивности вблизи фокуса в зависимости от выбранной модели изгиба поверхности кристалла. Рассмотрены спектральные характеристики фокусирующего спектрометра Иоганна. Проведено сравнение с ранее существовавшей теорией спектрометра Иоганна.

Динамическая теория фокусирующего спектрометра Иоганна [1] была построена в работах [2–4]. В статье [5] теоретически исследовался спектрометр Иоганна–Гамоша, обладающий теми же спектральными характеристиками, что и спектрометр Иоганна, но дающий выигрыш в светосиле из-за вертикальной фокусировки. Для разложения фазы падающей сферической и дифрагированной фокусирующейся волн в [2–5] использовалось параболическое приближение, что связано с выбором отражающей поверхности кристалла в виде параболического цилиндра. При этом для интенсивности сфокусированной волны получается бесконечно большое значение. Для устранения нефизичности полученного результата интегрирование по отражающей поверхности в [2–4] проведено с конечными пределами интегрирования.

В настоящей работе показано, что, разлагая фазу волны до членов $\sim x^3$ включительно (изгибом отражающей поверхности пренебрегаем, $z \approx 0$) или до членов $\sim x^4 (z \approx x^2/2R_x)$, мы получим две различные формулы для распределения интенсивности. Учет кубических и последующих степеней координаты x в разложении фазы означает учет влияния геометрических аберраций.

Рассмотрим две разные модели изгиба кристалла. В первой из них предположим, что слабый изгиб кристалла оставляет плоской отражающую поверхность кристалла ($z \approx 0$). Тогда для расстояния от точки падения произвольного луча до точки изображения получим:

$$L_h(x) = L_{h(0)}\big(1 + x\sin\varphi_h/L_{h(0)} + x^2\cos^2\varphi_h/2L_{h(0)}^2 - x^3\sin\varphi_h\cos^2\varphi_h/2L_{h(0)}^3\big). \quad (1)$$

Здесь $L_{h(0)}$ — „безаберрационное“ расстояние от кристалла до изображения. Формула (1) учитывает влияние аберраций до третьего порядка включительно.

Динамическая теория брэгговской дифракции в толстых кристаллах, развитая в [2–6], с учетом рентгенодифракционного и рентгенооптического принципов Гюйгенса–Френеля дает следующее выражение для интенсивности дифрагированной волны в точке ξ_p вблизи фокуса:

$$I_h(\xi_p) \sim \bigg|\bigg\{\varkappa^2 C\chi_{hr}\sigma_h \int\limits_{-\infty}^{+\infty} d\check{y}\,R(\check{y})/(8\pi^{3/2}R_x^2\sin^2 2\theta_B)\bigg\} \times \int\limits_{-\infty}^{+\infty} dx\,\exp\Big\{i\varkappa\big[\xi_p x\cos\varphi_h/L_{h(0)} - \check{y}\sigma_h x/\varkappa + \cos^2\varphi_h x^2/2L_{h(0)} - \cos\varphi_h x^2/2R_x - x^3\sin\varphi_h\cos^2\varphi_h/2L_{h(0)}^2\big]\Big\}\bigg|^2. \quad (2)$$

Здесь введены следующие обозначения: $\varkappa = 2\pi/\lambda$, λ — длина волны падающего излучения, C — поляризационный множитель, χ_{hr} — фурье-компонента рентгеновской поляризуемости, $\sigma_h = \varkappa\chi_h/2\cos\theta_B$, θ_B — брэгговский угол, R_x — радиус изгиба кристалла, $R\ (\check{y})$ — амплитудный плосковолновой коэффициент отражения, $\check{y}$ — нормированная угловая переменная, ξ_p — координата точки наблюдения в направлении, поперечном к отраженному пучку.

Интеграл по координате x в (2) сводится к функции Эйри $\Phi(A_1/\{3A_2\}^{1/3})$,

$$A_1 = -\varkappa\xi_p/R_x + \check{y}\sigma_h,\ A_2 = -\varkappa\cos\theta_B/2R_x^2.$$

Здесь для определенности рассмотрена симметричная геометрия дифракции:

$$\Phi(t) = (2^{-1}\pi^{-1/2}) \int\limits_{-\infty}^{+\infty} \exp\{i(ut + u^3/3)\}du$$

— функция Эйри. Интеграл по $\check{y}$ в (2) вычисляем методом стационарной фазы, положив $\check{y}_{st} \approx 0$. Наибольший максимум функции Эйри, равный 0.9494, достигается при $t_{\max} \cong -1.02$. Видно, что учет влияния сферической аберрации приводит к несовпадению положения геометрического фокуса ($\xi_p = 0$) и максимума интенсивности.

Учитывая свойства функции Эйри, найдем дифракционную ширину фокуса:

$$\Delta\xi_p \approx (3\pi)^{1/3} R_x^{1/3} (\cos\theta_B)^{1/3} \lambda^{2/3}. \tag{3}$$

Вторая модель изгиба кристалла учитывает изгиб поверхности кристалла ($z \approx x^2/2R_x$). В этом случае для схемы Иоганна получим:

$$L_h(x) = L_{h(0)}[1 + x\sin\varphi_h/L_{h(0)} + x^4\{-5\sin^2\varphi_0/2 + 1\}/(4R_x^4\cos^2\varphi_0)$$
$$+ x^4\{3\sin^2\varphi_0 - 1/2\}/(4R_x^4\cos^4\varphi_0). \tag{4}$$

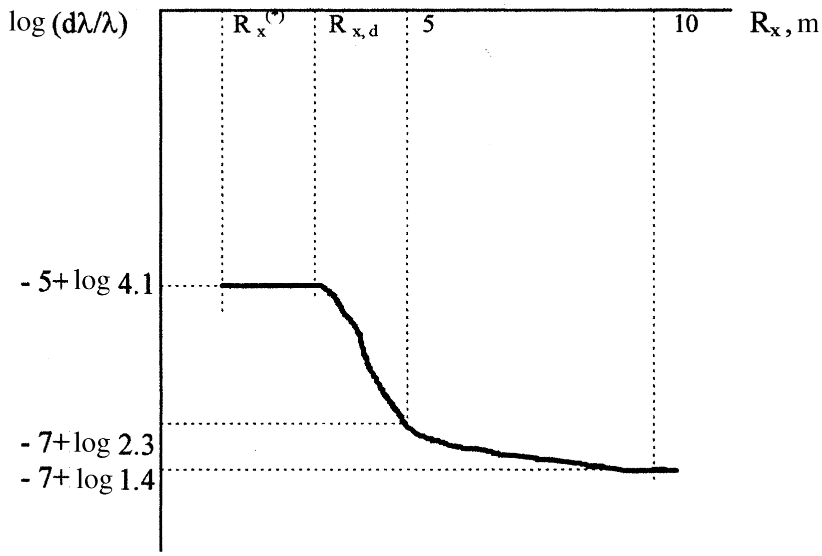
Несложные вычисления приводят к распределению интенсивности в виде интеграла Пирси [7] $I_p(B_1 = 0, B_2) = \int\limits_{-\infty}^{+\infty} \exp[i(B_2 t + t^4)]dt$,

$$B_2 = \varkappa\xi_p/\{R_x(B_4)^{1/4}\}, \tag{5}$$

$$B_4 = \varkappa L_{h(0)}\{-5\sin^2\varphi_0/2 + 1 + 3\,\mathrm{tg}^2\varphi_0 - 1/(2\cos^2\varphi_0)\}.$$

Рассмотрим теперь фокусирующий спектрометр Иоганна в рамках первой модели изгиба кристалла ($z \approx 0$). Спектральное разрешение, рассчитанное по формуле (3), оказывается хуже того, что получено авторами [2–4]. Учтем, что для источника размером d в когерентном дифракционном отражении используется только часть его: $d_{coh} \approx 2\Delta\theta L_0$. Здесь $\Delta\theta$ — угловая полуширина кривой отражения. Тогда спектральное разрешение равно

$$d\lambda/\lambda = \mathrm{ctg}\,\theta_B(\delta\xi_p + d_{coh})/L_{h(0)}$$
$$\sim \mathrm{ctg}\,\theta_B\big\{(3\pi\cos\theta_B)^{1/3}\lambda^{2/3}/(R_x^{2/3}\sin\theta_B) + 2\Delta\theta\big\}. \tag{6}$$



Логарифм спектрального разрешения фокусирующего спектрометра Иоганна как функция радиуса изгиба кристалла. Размер источника $d = 10\,\mu$m=const, $R_{x,d} = d/(2\Delta\theta \sin\theta_B)$, плоский участок на кривой соответствует радиусам, удовлетворяющим условию: $R_x \gg (3\pi\cos\theta_B)^{1/2}\lambda/\{(2\Delta\theta \cdot \sin\theta_B)^{3/2}\}$. $R_x^{(*)}$ — „критический" радиус, удовлетворяющий условию слабого изгиба отражающих плоскостей кристалла.

Численная оценка разрешения (6) для отражения (220) излучения CuKα от кристалла кремния $R_x \approx 1$ m, $\lambda = 1.54$ Å дает $d\lambda/\lambda \sim 5 \cdot 10^{-5}$.

Заметим, что величина спектрального разрешения при обратном рассеянии ($\theta_B \approx \pi/2$) в схеме Иоганна

$$(d\lambda/\lambda)_{\pi/2} \leqslant (3\pi)^{1/3}\lambda^{2/3}(\Delta\theta)^{4/3}/R_x^{2/3} + 2(\Delta\theta)^2 \qquad (7)$$

в несколько раз лучше, чем при $\theta_B \neq \pi/2 (\sim 1.8 \cdot 10^{-5})$.

При фиксированном размере d источника наилучшее спектральное разрешение спектрометра Иоганна достигается при радиусах изгиба $R_x > d/(2\Delta\theta\sin\theta_B)$ (см. рисунок). Видно, что при больших радиусах изгиба $R_x \geqslant 10$ m, удовлетворяющих условию $R_x \gg R_{x,d} = d/(2\Delta\theta\sin\theta_B)$, разрешение может быть порядка $\sim 10^{-7}$.

Список литературы

[1] *Johann H.H.* // Z. Phys. 1931. Bd. 69. N 3–4. S. 185.
[2] *Габриелян К.Т., Чуховский Ф.Н., Пинскер З.Г.* // ЖТФ. 1980. Т. 50. № 1. С. 3–11.
[3] *Чуховский Ф.Н.* // Металлофизика. 1981. Т. 3. № 5. С. 3–30.
[4] *Габриелян К.Т., Чуховский Ф.Н., Пискунов Д.И.* // ЖЭТФ. 1989. Т. 96. В. 3 (9). С. 834–846.
[5] *Габриелян К.Т., Демирчян Г.О., Чуховский Ф.Н.* // ЖТФ. 1990. Т. 60. № 1. С. 170–178.
[6] *Chukhovskii F.N., Gabrielyan K.T., Petrashen' P.V.* // Acta Cryst. 1978. A34. P. 610–621.
[7] *Pearsey T.* // Philos. Mag. 1946. V. 37. P. 311.