01;07

О геометрических аберрациях рентгеновского пучка при его лауэвском дифракционном отражении в схеме Кошуа

© Т. Чен

Московская государственная академия тонкой химической технологии им. М.В. Ломоносова,
117571 Москва, Россия
e-mail: docent65@mtu-net.ru,physicist@rambler.ru

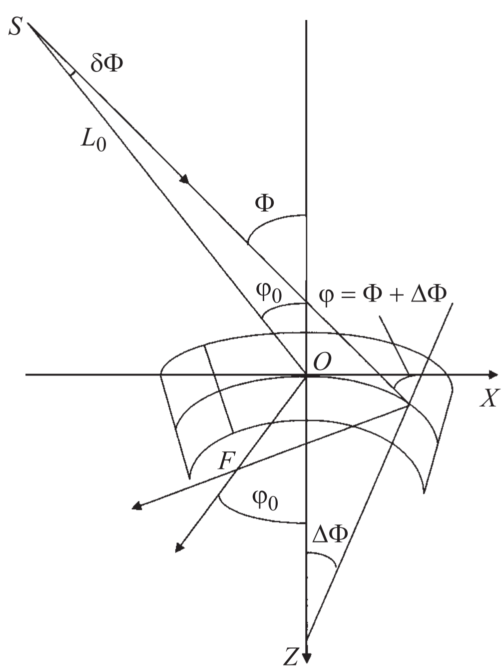
(Поступило в Редакцию 10 октября 2006 г.)

На основе геометрических представлений о распространении рентгеновского излучения рассмотрены аберрации отраженных лучей в схеме Кошуа. Показано, что величина геометрических аберраций может превышать ширину дельты Бормана, а также дифракционную ширину фокуса. Для уменьшения влияния аберраций рекомендуется коллимировать пучок до определенного размера.

PACS: 78.70.Ck, 42.15.Fr

Схема Кошуа [1–3] является самой известной фокусирующей схемой в геометрии Лауэ. Сферическая волна от протяженного источника падает на изогнутый кристалл, обращенный выпуклой стороной к источнику, и фокусируется в точку, лежащую на круге Роуланда. Фокусировка рентгеновского излучения в схеме Кошуа имеет практическое приложение в рентгеновской и гамма-спектроскопии. Изогнутые кристалл-спектрометры с фокусировкой по Кошуа использовались для спектрального разложения рентгеновского и гамма-излучений [4–23].

Вопрос о влиянии геометрических аберраций отраженных лучей на фокусировку по Кошуа практически не рассматривался в литературе. Можно предположить, что схема Кошуа не обеспечивает идеальной фокусировки.



Геометрия фокусировки сферической волны на изогнутом кристалле в схеме Кошуа. S — точечный источник рентгеновского излучения, F — фокус, $|SO| = L_0$, $|OF| = L_h$.

В настоящей статье мы детально исследуем этот вопрос. Кристалл будем считать тонким, т. е. многократным динамическим рассеянием внутри кристалла пренебрежем и траектории рентгеновских лучей принимаем прямыми линиями. Допустим также, что проекции смещения атомов вдоль осей x и z имеют следующий вид:

$$u_x = xz/R, \quad u_z \approx -x^2/2R, \tag{1}$$

где $R < 0$ — радиус изгиба кристалла в меридиональной плоскости.

Пусть сферическая волна исходит из источника S (см. рисунок), входящего в состав протяженного источника. Луч, падающий в центр кристалла, образует угол φ_0 с осью Z. Произвольный луч, падающий в точку с координатами $(x, z \approx -x^2/2R)$, после отражения кристаллом пересечется с дифрагированным лучом, соответствующим центральному падающему лучу, в точке с координатами (x_S, z_S):

$$x_S = -L_h \sin\varphi, \quad x_S^{(0)} = -L_h^{(0)} \sin\varphi_0,$$

$$z_S = L_h \cos\varphi, \quad z_S^{(0)} = L_h^{(0)} \cos\varphi_0. \tag{2}$$

Уравнение прямой, проходящей через точки (x, z) и (x_S, z_S), запишем в виде

$$(x_S - x)/(z_S - z) = -\mathrm{tg}(\varphi + \Delta\varphi), \tag{3}$$

где $\Delta\Phi = -x/R$, $z \approx u_z \approx -x^2/2R$.

Пусть $\Delta\Phi \ll \varphi$. Разложим tg в правой части (3) в ряд Тэйлора вблизи φ, ограничившись производными до четвертого порядка включительно. Тогда из уравнения (3) имеем

$$x_S - x = -\big[\mathrm{tg}\varphi + \Delta\Phi/\cos^2\varphi + (\Delta\Phi)^2 \sin\varphi/\cos^3\varphi + (\Delta\Phi)^3(1 + 2\sin^2\varphi)/(3\cos^4\varphi) + (\Delta\Phi)^4(2 + \sin^2\varphi)\sin\varphi/(3\cos^5\varphi)\big](z_S + x^2/2R). \tag{4}$$

Из рисунка видно, что

$$\varphi = \varphi_0 + x(\cos\varphi_0/L_0 - 1/R). \tag{5}$$

Пусть $x/L_0 \ll \varphi_0$, $-x/R \ll \varphi_0$.

Разложим $\mathrm{tg}\varphi$ в ряд по степеням x вблизи $\mathrm{tg}\varphi_0$ до четвертой степени включительно

$$\begin{aligned}\mathrm{tg}\varphi &\cong \mathrm{tg}\varphi_0 + x(\cos\varphi_0/L_0 - 1/R)/\cos^2\varphi_0\\ &+ x^2(\cos\varphi_0/L_0 - 1/R)^2 \sin\varphi_0/\cos^3\varphi_0\\ &+ x^3(\cos\varphi_0/L_0 - 1/R)^3(1+2\sin^2\varphi_0)/(3\cos^4\varphi_0)\\ &+ x^4(\cos\varphi_0/L_0 - 1/R)^4(2+\sin^2\varphi_0)\sin\varphi_0/(3\cos^5\varphi_0).\end{aligned} \tag{6}$$

Аналогичным образом разложим $\sin\varphi$ и $\cos\varphi$

$$\begin{aligned}\sin\varphi \cong \sin\varphi_0 &+ x\cos\varphi_0(\cos\varphi_0/L - 1/R)\\ &- x^2(\cos\varphi_0/L_0 - 1/R)^2\sin\varphi_0/2\\ &- x^3(\cos\varphi_0/L_0 - 1/R)^3\cos\varphi_0/6\\ &+ x^4(\cos\varphi_0/L_0 - 1/R)^4\sin\varphi_0/24.\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\cos\varphi \cong \cos\varphi_0 &- x\sin\varphi_0(\cos\varphi_0/L_0 - 1/R)\\ &- x^2(\cos\varphi_0/L_0 - 1/R)^2\cos\varphi_0/2\\ &+ x^3(\cos\varphi_0/L_0 - 1/R)^3\sin\varphi_0/6\\ &+ x^4(\cos\varphi_0/L_0 - 1/R)^4\cos\varphi_0/24.\end{aligned} \tag{7}$$

Разложим также $\Delta\Phi$ со степенями от первой до четвертой в ряд по x:

$$\begin{aligned}\Delta\Phi/\cos^2\varphi &\cong -x/(R\cos^2\varphi)\\ &\times\{1 + 2x\,\mathrm{tg}\,\varphi_0(\cos\varphi_0/L_0 - 1/R)\\ &+ x^2(\cos\varphi_0/L_0 - 1/R)^2(1+2\sin^2\varphi_0)/\cos^2\varphi_0\\ &+ x^3(\cos\varphi_0/L_0 - 1/R)^3(8\,\mathrm{tg}^3\varphi_0 - 4\,\mathrm{tg}\,\varphi_0/3)\}\\ &+ x^4(\cos\varphi_0/L_0 - 1/R)^4(\mathrm{tg}^4\varphi_0 + \mathrm{tg}^2\varphi_0/3 - 1/3).\end{aligned} \tag{8}$$

$$\begin{aligned}(\Delta\Phi)^2\sin\varphi/\cos^3\varphi &\cong x^2\{1 + x(3\,\mathrm{tg}\,\varphi_0 + \mathrm{ctg}\,\varphi_0)\\ &\times(\cos\varphi_0/L_0 - 1/R) + x^2(4 + 6\,\mathrm{tg}^2\varphi_0)\\ &\times(\cos\varphi_0/L_0 - 1R)^2\}\sin\varphi_0/(R^2\cos^3\varphi_0).\end{aligned} \tag{9}$$

$$\begin{aligned}(\Delta\Phi)^3(1+2\sin^2\varphi)/(3\cos^4\varphi) &\cong -x^3/(3R^3\cos^4\varphi_0)\\ &\times\{1 + 2\sin^2\varphi_0 + x(\cos\varphi_0/L_0 - 1/R)\\ &\times(8\sin^2\varphi_0\,\mathrm{tg}\,\varphi_0 + 2\sin(2\varphi_0) + 4\,\mathrm{tg}\,\varphi_0)\}.\end{aligned} \tag{10}$$

$$\begin{aligned}(\Delta\Phi)^4&(2+\sin^2\varphi)\sin\varphi/(3\cos^5\varphi)\\ &\cong x^4(2+\sin^2\varphi_0)\sin\varphi_0/(3R^4\cos^5\varphi_0).\end{aligned} \tag{11}$$

С учетом (8)–(11) получаем координату x_S:

$$\begin{aligned}x_S &= x(1 + z_S/(L_0\cos\varphi_0)) + x^2\{\mathrm{tg}\,\varphi_0/(2R)\\ &+ z_S\,(1/L_0^2 - 2/(R^2\cos^2\varphi_0))\,\mathrm{tg}\,\varphi_0\}\\ &+ x^3[\cos\varphi_0/(2L_0R\cos^2\varphi_0)\\ &+ (\cos\varphi_0/L_0 - 1/R)^3(1+2\sin^2\varphi_0)z_S/(3\cos^4\varphi_0)\\ &+ (\cos\varphi_0/L_0 - 1/R^2)(1+2\sin^2\varphi_0)z_S/(R\cos^4\varphi_0)\\ &+ (1+2\sin^2\varphi_0)z_S/(3R^3\cos^4\varphi_0)\\ &- z_S(\cos\varphi_0/L_0 - 1/R)\\ &\times(3\,\mathrm{tg}\,\varphi_0 + \mathrm{ctg}\varphi_0)\sin\varphi_0/(R^2\cos^3\varphi_0)]\\ &+ x^4[(2+\sin^2\varphi_0)z_S(\sin\varphi_0/L_0 - 1/R)\\ &\times(3\,\mathrm{tg}\,\varphi_0 + \mathrm{ctg}\varphi_0)\sin\varphi_0/(R^2\cos^3\varphi_0)]\\ &+ x^4[(2+\sin^2\varphi_0)z_S\sin\varphi_0(\cos\varphi_0/L_0 - 1/R)^4/(3\cos^5\varphi_0)\\ &+ (\cos\varphi_0/L_0 - 1/R)^3(8\,\mathrm{tg}^3\varphi_0 - 4\,\mathrm{tg}\,\varphi_0/3)z_S/(R\cos^2\varphi_0)\\ &- (\cos\varphi_0/L_0 - 1/R)^2(4 + 6\,\mathrm{tg}^2\varphi_0)z_S\sin\varphi_0/(R^2\cos^3\varphi_0)\\ &+ (\cos\varphi_0/L_0 - 1/R)^2\sin\varphi_0/(2R\cos^3\varphi_0)\\ &+ 2z_S(\cos\varphi_0/L_0 - 1/R)(2\,\mathrm{tg}\,\varphi_0\\ &+ 4\sin^2\varphi_0\,\mathrm{tg}\,\varphi_0 + \sin(2\varphi_0))/(3R^3\cos^4\varphi_0)\\ &+ (\cos\varphi_0/L_0 - 1/R)\,\mathrm{tg}\,\varphi_0/(R^2\cos^2\varphi_0)\\ &- (2+\sin^2\varphi_0)z_S\sin\varphi_0/(3R^4\cos^5\varphi_0)].\end{aligned} \tag{12}$$

Из (12) видно, что при $L_0 = R\cos\varphi_0$ (т. е. мнимый источник лежит на круге Роуланда) величина аберраций много меньше

$$\begin{aligned}x_S = &- z_S\,\mathrm{tg}\,\varphi_0 + x(1 + z_S/(R\cos^2\varphi_0))\\ &- x^2(z_S\sin\varphi_0/(R^2\cos^3\varphi_0) - \mathrm{tg}\,\varphi_0/(2R))\\ &+ x^3(1/(2R^2\cos^2\varphi_0)\\ &+ z_S(1+2\sin^2\varphi_0)/(3R^3\cos^4\varphi_0))\\ &- x^4 z_S\sin\varphi_0(2+\sin^2\varphi_0)/(3R^4\cos^5\varphi_0).\end{aligned} \tag{13}$$

Линейные по x аберрации отсутствуют, если $z_S = L_h^{(0)}\cos\varphi_0 = -R\cos^2\varphi_0$, т. е. в схеме Кошуа. Величина квадратичных аберраций $\approx -\mathrm{tg}\,\varphi_0 x^2/(2R)$. Пусть $x \sim 10^{-3}$ m, $R \sim 1$ m, тогда квадратичные аберрации имеют величину $\approx -10^{-6}\,\mathrm{m}\cdot\mathrm{tg}\,\varphi_0/2$. Ширина дельты Боррмана $\Delta \cong 2t\,\mathrm{tg}\,\varphi_0$. Для кристаллов толщиной $t \geq 10\,\mu$m значением квандратичных аберраций можно пренебречь. Однако для $x \sim 10^{-2}$ m величина аберраций возрастает на два порядка и может быть сравнима с Δ, а также с дифракционным уширением изображения источника. Например, для симметричного (220)-отражения CuK_α-излучения от кристалла кремния, изогнутого с радиусом изгиба $R \sim 1\,\mathrm{m}$, дифракционная ширина фокуса равна $\Delta x_F \sim 5 \cdot 10^{-6}\,\mathrm{m}$ [8], а аберрационное уширение составляет величину $\approx 2.5 \cdot 10^{-5}\,\mathrm{m}$.

Таким образом, для уменьшения влияния аберраций необходимо коллимировать пучок до размера $\sim 10^{-3}\,\mathrm{m}$.

В заключение отметим, что в настоящей работе были рассмотрены геометрические аберрации при кинематическом лауэвском отражении рентгеновской волны в тонком кристалле. Однако аналогичным образом могут быть проанализированы аберрации в толстом „динамическом“ изогнутом кристалле, отражающие плоскости которого совпадают с нормальными поперечными сечениями и образуют веер. В этом случае траектории лучей внутри кристалла будут прямолинейными.

Список литературы

[1] *Cauchois Y.* // J. Phys. Rad. 1932. Vol. 3. P. 320–336.
[2] *Cauchois Y.* // Comp. Rend. Acad. Sci. IIB. 1932. Vol. 194. P. 362–365.
[3] *Cauchois Y.* // Ann. Phys. 1934. Vol. 1. P. 215–266.
[4] *Лукирский П.И., Сумбаев О.И.* // Изв. АН СССР. Сер. Физ. 1956. Т. 20. С. 903.
[5] *Kasi A.H., Rasmussen N.C., Mark H.* // Rev. Sci. Instr. 1960. Vol. 31. P. 983–987.
[6] *Sumbaev O.I., Smirnov A.I.* // Nucl. Instr. and Meth. 1963. Vol. 22. P. 125–137.
[7] *Тюнис А.В., Самсонов В.М., Сумбаев О.И.* Кристалл-дифракционный спектрометр для измерения химических смещений рентгеновских линий L-серии актинидов. Препринт ЛИЯФ-151. Л., 1975. 16 с.
[8] *Габриелян К.Т., Чуховский Ф.Н., Пинскер З.Г.* // ЖТФ. 1980. Т. 50. Вып. 8. С. 1641–1646.
[9] *Сумбаев О.И., Лапин Е.Г.* // ЖЭТФ. 1980. Т. 78. Вып. 2. С. 802–812.
[10] *Григорьев Б.В., Иванов Ю.М., Денисов С.А.* и др. Кристалл-дифракционный спектрометр по Кошуа для изучения рентгеновского излучения пионных атомов на синхроциклотроне ЛИЯФ. Препринт ЛИЯФ-1232. Л., 1986. 50 с.
[11] *André J.M., Kefi M., Avila A., Couillaux P., Bonnelle C.* // Rev. Sci. Inst. 1987. Vol. 58. P. 374–378.
[12] *Verman B.S., Serikov I.V.* // X-Ray Spectrometry. 1990. Vol. 19. Iss. 3. P. 129–132.
[13] *Deshpande S.D., Moghe N.V., Sapre V.B., Mande C.* // Meas. Sci. Technol. 1990. Vol. 1. P. 1250–1253.
[14] *Badura E., Besch H.J., Beyer H.F.* et al. A Transmission-Type Crystal Spectrometer for Fast-Beam Spectroscopy. Scientific report JB-Tech-97. 1997.
[15] *Baronova E.O., Stepanenko M.M.* // Nukleonika. 2001. Vol. 46. Suppl. 1. P. S53–S56.
[16] *Baronova E.O., Stepanenko M.M., Lider V.V., Pereira N.R.* // Proc. Workshop on Curved Crystals. Weimar, Germany, 1964.
[17] *Баронова Е.О., Степаненко М.М.* // Прикладная физика. 2001. № 2. С. 106–111.
[18] *Baronova E.O., Stepanenko M.M., Pereira N.R.* // Rev. Sci. Instr. 2001. Vol. 72(2). P. 1416–1420.
[19] *Hiraoka N., Itou M., Ohata T., Mizumaki M., Sakurai Y., Sakai N.* // J. Synchr. Rad. 2001. Vol. 8. P. 26–32.
[20] *Alexeev V.L., Rumiantsev V.L.* // Proc. 11th Int. Symp. on Capture Gamma-Ray Spectroscopy and Related Topics / Ed. by J. Kvasil, P. Sejnar, M. Krticka. World Scientific, 2003. P. 625–628.
[21] *Alexeev V.L., Rumiantsev V.L.* Modernization of the Crystal Diffraction Gamma-Spectrometer GSK-2. Preprint PNPI-2523. Gatchina, 2003. P. 25.
[22] *Алексеев В.Л., Румянцев В.Л.* // Изв. РАН. Сер. Физ. 2004. Т. 68. № 8. С. 1080.
[23] *Алексеев В.Л., Румянцев В.Л., Федоров В.В.* Измерения гамма-спектра активной зоны реактора на кристалл-дифракционном гамма-спектрометре ГСК-2М. Препринт ПИЯФ-2605. Гатчина, 2005. 35 с.