01;07

# К динамической теории фокусирующего спектрометра Кошуа

© Т. Чен

Московская государственная академия тонкой химической технологии им. М.В. Ломоносова,
119571 Москва, Россия
e-mail: docent65@mtu-net.ru, physicist@rambler.ru

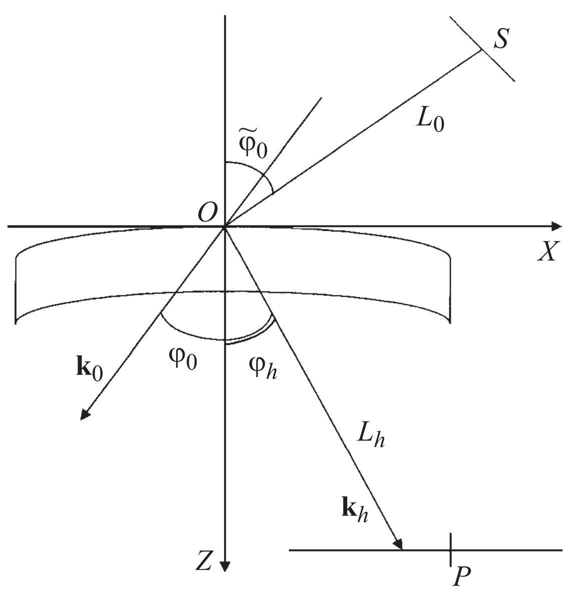
(Поступило в Редакцию 10 октября 2006 г.)

Представлена динамическая теория Лауэ-дифракции рентгеновской волны на совершенном изогнутом кристалле в схеме Кошуа. Рассмотрены случаи сферически расходящейся и сходящейся волн. Получены оценки спектрального разрешения фокусирующего спектрометра по Кошуа.

PACS: 41.50.+h, 78.70.Ck, 07.85.Nc

Наиболее известной схемой фокусировки рентгеновского излучения при его Лауэ-дифракции на изогнутом кристалле является схема, предложенная в 1930-х гг. И. Кошуа [1–3]. Первый в СССР кристалл-дифракционный фокусирующий спектрометр Кошуа был создан в 1950-х гг. [4]. Спектрометр по Кошуа часто использовался в экспериментальных и теоретических работах по рентгено- и гамма-спектральному анализу [5–23]. В ряде работ предложена комбинированная схема Кошуа–Иоганссона [15–18].

При этом в большинстве теоретических исследований дифракция рентгеновских лучей в изогнутом кристалле рассматривалась лишь кинематически. Автору настоящей работы известны лишь две статьи [8,9], в которых рассматривалась динамическая дифракция рентгеновского излучения в схеме Кошуа.




Геометрия Лауэ-дифракции сферической волны на изогнутом кристалле. $\mathbf{k}_{0,h}$ — волновые вектора падающей и дифрагированной волн, соответствующие точному брэгговскому условию, $\mathbf{k}_h = \mathbf{k}_0 + \mathbf{h}$, $\mathbf{h}$ — вектор обратной решетки идеального кристалла, $S$ — точечный источник рентгеновского излучения, $P$ — точка наблюдения.

Целью настоящей статьи является дальнейшее развитие теории динамической дифракции рентгеновской волны в схеме Кошуа. За основу берется теория лауэ-дифракции рентгеновского излучения в изогнутых совершенных кристаллах, построенная в работах Ф.Н. Чуховского с соавторами [8,24,25].

Рассмотрим изогнутый совершенный кристалл, обращенный выпуклой стороной к протяженному источнику рентгеновского излучения (см. рисунок). Пусть из точечного источника $S$, входящего в состав протяженного источника, исходит сферическая волна.

Вычислим поле дифрагированной волны на выходной поверхности изогнутого кристалла. Согласно динамической теории Лауэ-дифракции рентгеновских лучей на изогнутом кристалле [24,25], амплитуда дифрагированной волны на выходной поверхности кристалла имеет следующий вид:

$$\begin{aligned} E_h(\mathbf{r}_T) = \exp\Big[ & iq_0x_T + i4^{-1}a^{-1}\varkappa\chi_0 t(\gamma_0^{-1}a_h + \gamma_h^{-1}a_0) \\ & + 2^{-1}iR^{-1}\varkappa\gamma_h(x_T - a_h t)^2 - 4ia^2Bt^2 + i\pi/2 + i\varkappa L_0\Big] \\ & \times L_0^{-1}\sigma_h \int_{-\infty}^{+\infty} dx \exp(-i\varkappa\gamma_0\Delta\theta x) \exp\Big[i\varkappa(\gamma_0^2x^2 + y^2)/(2L_0) \\ & - i\varkappa y^2 x\sin\varphi_0/(2L_0^2) - i2^{-1}R^{-1}\varkappa\gamma_0 x^2 - iq_0x\Big](2\pi)^{-1} \\ & \times \int_{-\infty}^{+\infty} dk \exp\big[-ik(x_T - x + a_0 t)\big] \times G_h(k,t). \end{aligned} \tag{1}$$

Здесь введены следующие обозначения: $q_0 = \varkappa\chi_0(\gamma_0^{-1} - \gamma_h^{-1})/(4a)$, $2a = a_0 - a_h$, $a_{0,h} = \operatorname{tg}\varphi_{0,h}$, $\sigma_h = C\varkappa\chi_h\gamma_0/(2\sin 2\theta_B)$, $\mathbf{r}_T = (x_T, y_T)$, $R$ — радиус изгиба кристалла, $L_0$ — расстояние от точечного источника до центра кристалла, $\varkappa = 2\pi/\lambda$, $\lambda$ — длина волны падающего излучения, $\gamma_0$ и $\gamma_h$ — направляющие косинусы для волновых векторов падающего и отраженного излучений, $\varphi_{0,h} = \arccos\gamma_{0,h}$, $\theta_B$ — брэгговский угол, $\Delta\theta = \widetilde{\varphi}_0 - \varphi_0$, $\chi_0$ и $\chi_h$ — фурье-компоненты рентгеновской поляризуемости, $C$ —

поляризационный фактор, $t$ — толщина кристалла, $G_h(k,t)$ — фурье-компонента функции Грина для изогнутого совершенного кристалла, $B$ — градиент деформации.

В дальнейшем мы будем рассматривать кристалл, отражающие плоскости которого совпадают с нормальными поперечными сечениями и располагаются веерообразно, т. е. градиент деформации $B = 0$ [8].

Согласно рентгено-оптическому принципу Гюйгенса–Френеля, дифрагированная волна в вакууме на расстоянии $L_h$ от кристалла является сверткой дифрагированной волны $E_h(\mathbf{r}_T)$ на выходной поверхности кристалла с функцией Грина в вакууме $G_0(\mathbf{r})$:

$$E_h(\mathbf{r}_P)\exp[i\mathbf{k}_h\mathbf{r}_P] = 2\exp(-i\pi/2)\varkappa\gamma_h \times \int d^2\mathbf{r}_T E_h(\mathbf{r}_T)\exp[i\mathbf{k}_h\mathbf{r}_T]G_0(\mathbf{r}_P-\mathbf{r}_T),$$

$$G_0(\mathbf{r}) = \exp(i\varkappa r)/(4\pi r). \tag{2}$$

В рамках параболического приближения разложим функцию $G_0(\mathbf{r}_P-\mathbf{r}_T)$, ограничившись в фазе квадратичными по координатам слагаемыми

$$G_0(\mathbf{r}_P-\mathbf{r}_T) \cong (4\pi L_h)^{-1}\exp(i\varkappa L_h)\exp\Big[-i\varkappa x_T\sin\varphi_h + i(2L_h)^{-1}\varkappa\big(\gamma_h^2\{x_P-x_T-L_h\sin\varphi_h\}^2+\{y_P-y_T\}^2\big) \times\{1-\sin\varphi_h(x_P-x_T-L_h\sin\varphi_h)/L_h\}\Big]. \tag{3}$$

Тогда амплитуда дифрагированной волны в вакууме равна

$$E_h(\mathbf{r}_P)\exp[i\mathbf{k}_h\mathbf{r}_P] = 2(2\pi)^{-1}\exp(-i\pi/2)\varkappa\gamma_h \times\exp\big\{i4^{-1}a^{-1}\varkappa\chi_0 t(\gamma_0^{-1}a_h+\gamma_h^{-1}a_0)+i\varkappa L_0\big\}L_0^{-1}\sigma_h \times\int dx_T\exp\big\{iq_0x_T-ikx_T+2^{-1}iR^{-1}\varkappa\gamma_h(x_T-a_ht)^2 + 2^{-1}iL_h^{-1}\varkappa\gamma_h^2x_T^2-iL_h^{-1}\varkappa\gamma_h^2x_Px_T+i\varkappa\gamma_h^2x_T\sin\varphi_h\big\} \times\int\limits_{-\infty}^{+\infty}dk\exp[-ik(x+a_0t)]\times G_h(k,t). \tag{4}$$

При $L_h = -R\gamma_h$, что соответствует схеме Кошуа со сферически расходящейся волной, падающей на выпуклый кристалл, в интеграле по $x_T$ пропадают квадратичные члены. В этом случае при бесконечных пределах интегрирования интеграл по $x_T$ сводится к $\delta$-функции, и интеграл по $k$ немедленно вычисляется, приводя к результату, полученному в [8].

Рассмотрим теперь симметричную дифракцию, когда $\gamma_0 = \gamma_h = \cos\theta_B$. Кроме того, пусть $L_h = -R\cos\theta_B = -L_0$, где $L_0 < 0$, что соответствует расположению мнимого источника на круге Роуланда. Тогда интеграл по $x$ в (1) сводится к $\delta$-функции, а интеграл по $k$ равен

$$G_h(q_0+\varkappa\gamma_0\Delta\theta)\exp[-i(q_0+\varkappa\gamma_0\Delta\theta)(x_T+a_0t)]. \tag{5}$$

Амплитуда дифрагированной волны в вакууме равна

$$E_h(\mathbf{r}_P)\exp[i\mathbf{k}_h\mathbf{r}_P] = 2(2\pi)^{-1}\exp(-i\pi/2)\varkappa\gamma_h \times\exp\big\{i4^{-1}a^{-1}\varkappa\chi_0t(\gamma_0^{-1}a_h+\gamma_h^{-1}a_0)+i\varkappa L_0 - iq_0a_0t-i\varkappa\gamma_0\Delta\theta a_0t+2^{-1}iR^{-1}\varkappa\gamma_ha_h^2t^2\big\}L_0^{-1}\sigma_h \times G_h(q_0+\varkappa\gamma_0\Delta\theta)\int dx_T\exp\big\{-i\varkappa\gamma_0\Delta\theta x_T - iR^{-1}\varkappa\gamma_hx_Ta_ht-iL_h^{-1}\varkappa\gamma_h^2x_Px_T+i\varkappa\gamma_h^2x_T\sin\varphi_h\big\}. \tag{6}$$

Выражение (6) дает амплитуду волны в схеме Кошуа при падении на кристалл сферически сходящейся волны. Фокусом является мнимый фокус, расположенный на круге Роуланда. В работе [8] рассматривался лишь случай расходящейся волны, но было отмечено, что более резкая фокусировка должна получаться при падении на кристалл сходящейся волны.

В рамках параболического приближения для фазы падающей и дифрагированной волн интеграл по $x_T$ в (6) должен вычисляться с конечными пределами интегрирования: $-x_{\text{eff}} \le x_T \le x_{\text{eff}}$. Результатом интегрирования является функция $2\sin(Ax_{\text{eff}})/A$, где $A = -L_h^{-1}\varkappa\gamma_h^2x_P - \varkappa\gamma_0\Delta\theta - R^{-1}\varkappa\gamma_ha_ht + \varkappa\gamma_h^2\sin\varphi_h$. Заметим, что главный максимум смещен относительно точки геометрического фокуса $x_P = 0$. Кроме того, видно, что при фокусировке сходящейся волны распределение интенсивности вблизи фокуса оказывается зависящим от положения произвольного точечного источника, входящего в состав протяженного источника.

Полагая аргумент синуса в функции распределения интенсивности равным $\pi$, находим дифракционное уширение фокуса $\Delta x_{P,F}$:

$$\Delta x_{P,F} = \pi L_h/(\varkappa\gamma_h^2x_{\text{eff}}). \tag{7}$$

Для симметричного (220)-отражения $\mathrm{Cu}K_\alpha$-излучения от кристалла кремния, изогнутого с радиусом $R = 1$ m, и при $x_{\text{eff}} = 10^{-2}$ m получим $\Delta x_{P,F} \sim 10^{-8}$ m.

Спектральное разрешение фокусирующего спектрометра Кошуа равно

$$\Delta\lambda/\lambda = -\operatorname{ctg}\theta_B(\Delta\theta)_F,\ \ (\Delta\theta)_F = \Delta x_{P,F}\gamma_h/L_h. \tag{8}$$

Теоретическая оценка на основе (8) дает $\Delta\lambda/\lambda \sim 10^{-8}$.

Учитывая протяженность источника в схеме Кошуа, следует вместо $\Delta x_{P,F}$ подставить в (8) размер $l$ источника. Тогда получим более реальную оценку для спектрального разрщения. Например, при $l \cong 10^{-3}$ m имеем $\Delta\lambda/\lambda \sim 10^{-3}$, что согласуется с экспериментальными данными [14].

## 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] *Kazi 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 А.С.* 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. Instr. 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. // Scientific report JB-Tech-97. 1997.
[15] *Baronova E.O., Stepanenko M.M.* // Nukleonika. 2001. Vol. 46. 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. 11$^{th}$ 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.
[24] *Chukhovskii F.N., Petrashen' P.V.* // Acta Cryst. 1977. Vol. A33. P. 311–319.
[25] *Чуховский Ф.Н.* // Металлофизика. 1980. Т. 2. № 6. С. 3–28.