

ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ

Дубна

P14-99-277

Л.Н.Гынгазов, С.И.Тютюнников

ВЛИЯНИЕ ВОЛНОВОДНОГО ЭФФЕКТА
НА ПРОФИЛЬ ИНТЕНСИВНОСТИ
ПРИ БРЭГГОВСКОЙ ДИФРАКЦИОННОЙ
ФОКУСИРОВКЕ

Направлено в журнал «Поверхность. Рентгеновские, синхротронные
и нейтронные исследования»

1999

Влияние волноводного эффекта на профиль интенсивности при брэгговской дифракционной фокусировке

На основании формализма динамической теории дифракции на упруго-изогнутом кристалле проводится количественный расчет пространственного и спектрального распределения интенсивности рентгеновского излучения в формируемом этим кристаллом фокусе для часто реализуемого на практике случая большого радиуса изгиба. Выявляется разделение общей интенсивности на дифракционную и деформационную части, последняя из которых обусловлена волноводным эффектом при распространении дифрагирующей моды внутри кристалла и для которой дается аналитическое выражение. Делается заключение о характере влияния вычисляемой деформационной поправки на значения пространственной и спектральной дисперсий в фокусе, а также обсуждаются параметры задачи, при которых это влияние становится определяющим.

Работа выполнена в Лаборатории физики частиц ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна, 1999

The Waveguide Effect in the Bragg Diffraction Focusing

On the basis of the formalism of dynamical theory of diffraction on elastically bent crystal the quantitative calculation of spatial and spectral intensity distributions in the focus formed by the crystal is carried out for the case of a large bending radius. The diffraction and deformation parts of the general intensity being selected, the last one which is given rise by waveguide effect of a diffraction mode in the crystal bulk is described analytically. The inferences are made concerning the rate of influence of deformation part obtained on the values of spatial and spectral dispersions in focus and the parameters of the problem which make this influence dramatic are discussed.

The investigation has been performed at the Laboratory of Particle Physics, JINR.

1 Введение

В существующих экспериментальных [1] и теоретических [2], [3] исследованиях по теории фокусирующих брэгговских рентгеновских спектрометров на изогнутом кристалле устанавливается, что наибольшее спектральное разрешение ($\Delta\lambda/\lambda < 10^{-7}$) в таких устройствах достигается при соблюдении условия слабого изгиба поверхности отражающего кристалла. Увеличение радиуса изгиба кристалла в энергодисперсионных схемах для поглощательной спектроскопии обеспечивает уменьшение размера области полихроматического фокуса ($< 1\text{см}$), что подготавливает условия для проведения экспериментов на образцах малых объемов. Поэтому возможная конкретизация количественных характеристик фокусного изображения в дифракционных спектрометрах на слабоизогнутом кристалле давала бы ключ к оптимизации методик экспериментов на таких устройствах. Для этой цели оказываются действенными асимптотические методы теории динамической дифракции на деформированных кристаллах. В обстоятельствах постоянного повышения светосильных характеристик источников синхротронного излучения (значение яркости рентгеновского излучения ондуляторов ESRF составляет 10^{20} фот./с · мрад² · мм² · 0,1%) [4]), с использованием которых осуществляется современное применение спектрометрических установок на изогнутых кристаллах, детализация расчетов интенсивности формируемых фокальных изображений становится необходимой, ибо величины вычисляемых в таких случаях поправок приобретают значения, приводящие к существенному влиянию на результаты опытов, проводимых в данном случае [5], и обеспечивающие возможность проверки теоретических представлений об этом явлении вообще.

В работе рассматривается процесс фокусировки плоской волны цилиндрически изогнутым по постоянному радиусу кристаллом. Существование деформации внутри кристалла приводит к двум основным последствиям: формированию фокуса у фронта дифрагированной волны и росту величины интенсивности в фокусе по сравнению с интенсивностью волны, дифрагированной на плоском кристалле. Современный уровень анализа проблемы дифракции Брэгга на деформированном кристалле позволяет точно описать дифрагированное поле в случае деформации с постоянным градиентом напряжений (т. е. деформации изгиба постоянной кривизны) [6]. Если интенсивность поля в области фокуса определять на основании амплитуды волны, дифрагированной от плоского кристалла, то такое приближение в вычислениях будет основным [3]. Выход за его рамки приводит к необходимости учитывать влияние деформации на значение дифрагированной компоненты (волноводный эффект). В данной работе для случая брэгговской дифракции плоской волны с использованием формализма функции Грина аналитически определяется вид амплитуды волны в области фокуса с учетом волноводного эффекта при больших радиусах изгиба. На основе этой амплитуды строятся пространственное и угловое распределения интенсивности и определяются режимы влияния деформации на них.

2 Дифрагирующее поле в фокусе

В соответствии с формализмом и обозначениями теории дифракции на деформированных кристаллах [7] амплитуда дифрагированной волны ϵ_h внутри кристалла, находящегося под действием деформации с вектором $\vec{u}(\vec{r})$, таким, что

$$\vec{h}\vec{u}(\vec{r}) = 2(As_0^2 + 2Bs_0s_h + Cs_h^2),$$

связана с амплитудой падающей волны ϵ_0 согласно соотношению

$$E_h(s_0, s_h) = i\sigma_h \int_{-\infty}^{\infty} G(s_0, s_h; s, s) e^{-4iBs^2} E_0(s, s) ds, \quad (1)$$

где

$$E_0(s_0, s_h) e^{i\vec{k}\vec{r}} = \epsilon_0(s_0, s_h) \exp -i(k(\chi_0 s_0/\gamma_0 + (\chi_0 - 2 \sin 2\theta \Delta\theta) s_h/|\gamma_h|)/2 + 2Cs_h^2),$$

$$E_h(s_0, s_h) e^{i(\vec{k}+\vec{h})\vec{r}} = \epsilon_h(s_0, s_h) \exp -i(k(\chi_0 s_0/\gamma_0 + (\chi_0 - 2 \sin 2\theta \Delta\theta) s_h/|\gamma_h|)/2 - 2As_0^2),$$

G — функция Грина (ФГ) дифрагирующей компоненты поля

$$G(s_0, s_h; s'_0, s'_h) = \sqrt{\frac{i}{4B}} e^{-2iB\xi_0(s_h+s'_h)} \int_{-\infty}^{i\infty} e^{p(\xi_0+\xi_h)/2} \cdot \quad (2)$$

$$\frac{D_{-\nu-1} \left[-\sqrt{\frac{i}{4B}} (p - 2iB(\xi_0 - \xi_h)) \right] dp}{D_{-\nu} \left[-\sqrt{\frac{i}{4B}} (p + 2iB(\xi_0 - \xi_h)) \right] 2\pi i},$$

$$\xi_{0,h} = s'_{0,h} - s_{0,h}, \quad s_{0,h} = (x - a_{h,0}z)/(2a), \quad 2a = a_0 - a_h, \quad a_{0,h} = \tan \varphi_{0,h},$$

$$\gamma_{0,h} = \cos \varphi_{0,h}, \quad \nu = i\sigma^2/(4B), \quad \sigma^2 = \sigma_h \sigma_{-h}, \quad \sigma_h = k\chi_h/(2|\gamma_h|), \quad \sigma_{-h} = k\chi_{-h}/(2\gamma_0),$$

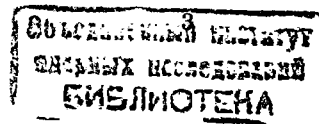
$D_\nu(\eta)$ — функция параболического цилиндра, A, B, C — константы упругой деформации, которые, в частности, подчиняются соотношениям [3]

$$(A + B)/a^2 = k|\gamma_h|/R, \quad (C + B)/a^2 = k\gamma_0/R,$$

где R — радиус изгиба кристалла. Для ФГ на поверхности кристалла ($z = 0$) имеем

$$G(s_0, s_0; s'_0, s'_0) = e^{2iB(s_0'^2 - s_0^2)} \int_{-\infty}^{\infty} R_\nu(\eta) e^{i\sigma(s'_0 - s_0)\eta} \frac{d\eta}{2\pi}, \quad R_\nu = \sqrt{\nu} \frac{D_{-\nu-1}[-i\sqrt{\nu}\eta]}{D_{-\nu}[-i\sqrt{\nu}\eta]}. \quad (3)$$

Будем интересоваться процессом фокусировки плоской волны с волновым вектором (k_x, k_z) с компонентами, находящимися вблизи значений, удовлетворяющих условию Брэгга. На основании выражений (1) и (2) и с использованием рентгенооптического принципа Гюйгенса-Френеля можно получить следующее



выражение для амплитуды дифрагированной волны при некотором асимметричном отражении [8]

$$\varepsilon_h(x, k_x, k_z) = \sigma_h \gamma_h \sqrt{\frac{\pi k}{2(B+C)\alpha_h}} \exp ik \left(L_h + \frac{x^2}{2L_h} \right) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\eta}{2\pi} R_\nu(\eta) \cdot \exp i \left[\frac{\sigma^2 \eta^2}{8(B+C)} - \frac{L_h}{2\alpha_h} \left(\frac{\sigma \eta}{2a} - \gamma_0(k \sin \theta + k_x \sin \varphi - k_z \cos \varphi) - \frac{k \gamma_h^2 x}{L_h} \right) \right], \quad (4)$$

где (рис.1) L_h - расстояние до каустики фронта, задаваемого этой амплитудой, x - пространственная координата, характеризующая поведение интенсивности в окрестности каустики, φ - угол асимметрии отражения, $\alpha_h = k \gamma_h^2 - L_h(A+B)/a^2$. Выражение (4) определяет значение амплитуды в зависимости от точки в фазовом пространстве (L_h, x, k_x, k_z) . Оно будет проходить через максимум вблизи значения L_h , когда

$$\alpha_h = L_h(B+C)/a^2, \quad L_h = R \gamma_h^2 / (\gamma_0 + |\gamma_h|),$$

и в обозначениях

$$N = \sigma_h \sqrt{2\pi R(\gamma_0 + |\gamma_h|)/k} / (2a\gamma_0), \quad \nu = i/(4\beta),$$

$$M = \sigma \{ R(k \sin \theta + k_x \sin \varphi - k_z \cos \varphi) / k + x(1 + |\gamma_h|/\gamma_0) \} / (2a),$$

с точностью до фазового множителя и фактора N , иметь вид фурье-образа ядра $R_\nu(\eta)$

$$\varepsilon_h(M) = N \int_{-\infty}^{\infty} R_\nu(\eta) e^{iM\eta} \frac{d\eta}{2\pi}. \quad (5)$$

С разницей в общем множителе и виде своего аргумента выражение (5) совпадает с ФГ (3). Амплитуда (5) будет заметно отличаться от нуля в некоторой окрестности точки $(L_h, 0, k \sin \varphi_0, k \gamma_0)$ фазового пространства, а интенсивность волны будет иметь угловое (спектральное) и пространственное фокальные распределения. Эти профили будут подобны ввиду зависимости амплитуды от величины M - линейной комбинации переменных, задающих соответствующие кривые.

Рассмотрим амплитуду волны при слабом изгибе кристалла $\beta \ll 1$ и воспользуемся для этого асимптотическим выражением для ядра R_ν . Имеем [7]

$$R_\nu(\eta) = \frac{-i}{\eta + \text{sign}(\eta)\sqrt{\eta^2 - 1}} (1 + 2i\theta(\eta)\sqrt{\eta^2 - 1} \exp(i f(\eta)/(2\beta))), \quad (6)$$

$$f(\eta) = \eta\sqrt{\eta^2 - 1} - \log(\eta + \sqrt{\eta^2 - 1}).$$

При определении амплитуды вдали от каустики интегрирование в (4) можно провести методом стационарной фазы. В этом случае угловое распределение

интенсивности дифрагированной волны будет определяться квадратом модуля функции (6), взятой при значении аргумента

$$\eta = \frac{\chi_0(1 + |\gamma_h|/\gamma_0) - 2 \sin 2\theta \Delta\theta}{\sqrt{|\gamma_h|/\gamma_0 \sqrt{\chi_h \chi_{-h}}}},$$

где $2\theta, \Delta\theta$ - углы рассеяния и качания соответственно. При углах качания, которым соответствует значение $\eta > 1$, интенсивность содержит осцилляции, объясненные волноводному эффекту при распространении дифрагированной волны в кристалле. Объяснение этого эффекта дается при переходе к приближению эйконала. При распространении узкого пучка излучения его траектория испытывает изгиб в том же направлении, в котором изогнут кристалл, до тех пор, пока повернувшийся луч частично не отразится от кристаллической поверхности с внутренней стороны и не продолжит движение под углом, близким к углу падения (рис.2). Подобная динамика приводит к осцилляторному поведению кривой качания, выражаемому вторым слагаемым в (6). Соотношение (6), будучи приближенным (не выполняются условия: $|R_\nu(\eta \rightarrow \infty)| \rightarrow 0$, $|R_\nu(\eta)|^2 < 1$), являются тем не менее единственным известным явным аналитическим выражением волноводного эффекта при слабом изгибе кристалла [6], [7], [8]. Первое бездеформационное слагаемое выражает приближение, когда кристалл рассматривается плоским. Второе слагаемое является основным в ряду поправок, вносимых деформацией. Неучтенные слагаемые выражаются в виде гармоник, кратных $1/(2\beta)$, и их вклад далее предполагается малым. Теперь амплитуда (5) будет описываться соотношением

$$\varepsilon_h(M) = N \left(\theta(M) \frac{J_1(M)}{M} + 2 \int_0^\infty \frac{\sqrt{\eta^2 - 1}}{\eta + \sqrt{\eta^2 - 1}} \exp i(M\eta + f(\eta)/(2\beta)) \frac{d\eta}{2\pi} \right), \quad (7)$$

где $J_1(x)$ - функция Бесселя и подразумевается, что $\sqrt{\eta^2 - 1} = -i\sqrt{1 - \eta^2}$ при $\eta < 1$. Первое слагаемое характеризует фокальный профиль в приближении плоского кристалла. Спектральное разрешение и пространственная дисперсия установки, создающей излучение, описываемое в этом приближении, были рассчитаны в работе [3]. Второе слагаемое характеризует вклад в амплитуду, объясненный волноводному эффекту.

3 Деформационная поправка

Волноводные осцилляции обеспечивают дополнительный рост интенсивности, величину которого будем определять при $\beta \ll 1$. Интегрируя по частям и переходя к другим переменным интегрирования, придадим второму слагаемому в скобках выражения (7) вид

$$I(M) = 4\beta \left(\int_0^\infty (i + M \sinh u) e^{-u+iM \cosh u} \exp i \left[\frac{\sinh 2u - 2u}{4\beta} \right] \frac{du}{2\pi} \right) -$$

$$-4\beta \left(\frac{1}{2\pi} \exp\left(-\frac{\pi}{8\beta}\right) + \int_0^\pi (1 + M \sin \varphi) e^{iM \cos \varphi - i\varphi} \exp\left[\frac{\sin 2\varphi - 2\varphi}{4\beta}\right] \frac{d\varphi}{2\pi} \right).$$

Т. к. $\beta \ll 1$, оба интеграла будем вычислять разлагая показатели быстроосциллирующих экспонент вблизи начала координат и заменяя остальные медленные функции их значениями в нуле. Тогда выражение для поправки будет иметь следующий вид

$$2\pi I(M) \simeq -4\beta e^{-\frac{\pi}{8\beta}} + 4\beta^{4/3} e^{iM} (i f[\beta^{2/3} M/2] + 3^{1/3} g[(3\beta)^{2/3} M/2]), \quad (8)$$

где

$$f(x) = e^{\frac{2i}{3}x^3} \int_{-\infty}^x \exp(-i(\tau^3/3 - x^2\tau)) d\tau, \quad g(y) = \int_0^\infty e^{-t^3 - iy^2 t} dt.$$

При предельных значениях аргумента функции f и g обнаруживают следующее поведение

$$f(x) = \begin{cases} 2 \exp(2ix^3/3) \sin(2x^3/3 + \pi/4) / \sqrt{\pi x} & , x \rightarrow +\infty \\ i/x^2 & , x \rightarrow -\infty \end{cases} \quad (9)$$

$$g(y) = \begin{cases} \sqrt{i\pi/y} \exp(4iy^3/27) & , |y| \rightarrow \infty \\ \Gamma(1/3)/3 & , y = 0. \end{cases}$$

Для вычисления функции $f(x)$ разобьем ее на два интеграла

$$f(x) = e^{2ix^3/3} \left(\int_{-x}^x \exp(-i(\tau^3/3 - x^2\tau)) d\tau + \int_x^\infty \exp(-i(\tau^3/3 - x^2\tau)) d\tau \right)$$

и, переходя в первом и втором соответственно к новым вещественным переменным φ и t по формулам

$$\tau^3 - 3x^2\tau = 2x^3 \cos \varphi, \quad \tau^3 - 3x^2\tau = 2x^3 \cosh t,$$

получим

$$f(x) = \frac{2x}{3} e^{2ix^3/3} \left(\int_0^\pi \exp\left(-\frac{2i}{3}x^3 \cosh t\right) \sinh \frac{t}{3} dt + \int_0^\pi \exp\left(-\frac{2i}{3}x^3 \cos \varphi\right) \sin \frac{\varphi}{3} d\varphi \right).$$

Это выражение можно далее привести к виду

$$f(x) = x e^{2ix^3/3} \left(\frac{1}{3} \int_{-\infty}^\infty \exp(-2ix^3 \cosh u/3) e^{u/3} du + \sum_{n=-\infty}^\infty \frac{i^n J_n(2x^3/3)}{9n^2 - 1} \right),$$

причем остающийся интеграл эксплицируется через функции Ганкеля

$$\int_{-\infty}^\infty \exp\left(-\frac{2i}{3}x^3 \cosh u + \frac{u}{3}\right) du = -i\pi\theta(x) H_{-1/3}^{(2)}(2x^3/3) e^{i\pi/6} + i\pi\theta(-x) H_{-1/3}^{(1)}(-2x^3/3) e^{-i\pi/6}.$$

Этот интеграл является разрывным в начале координат, и, используя свойства функций Ганкеля, к предельным соотношениям (9) для функции $f(x)$ можно добавить выражение для величины скачка

$$f(+0) - f(-0) = 3^{1/3} \Gamma(1/3).$$

Выражение для функции $g(y)$ найдем, разлагая осциллирующую экспоненту подынтегрального выражения в ряд и интегрируя этот ряд почленно. Преобразовывая затем коэффициенты ряда с использованием формулы Гаусса-Лежандра для гамма-функции [9], получим следующее представление для $g(y)$

$$g(y) = \frac{2\pi}{3^{4/3}} e^{2iy^3/27} Bi(-y^2/3^{4/3}) - \frac{iy}{3} {}_2F_2(1/2, 1; 2/3, 4/3; 4iy^3/27),$$

где $Bi(z)$ - функция Эйри второго рода, ${}_2F_2$ - обобщенный гипергеометрический ряд [10] Т. о., в целом деформационная добавка (8) к значению величины амплитуды волны в фокусе (7) будет, в обозначении $\eta = \beta^{2/3} M/2$, иметь вид

$$2\pi I(M) = 4\beta \left\{ e^{-\frac{\pi}{8\beta}} - \beta^{1/3} e^{iM} (i\eta 3^{1/3} {}_2F_2(1/2, 1; 2/3, 4/3; 4i\eta^3/3) - e^{\frac{2i}{3}\eta^3} \frac{2\pi}{3} Bi(-\eta^2)) \right\} + \frac{4\pi\eta}{3} \beta^{4/3} e^{iM} e^{\frac{2i}{3}\eta^3} \left\{ \theta(\eta) H_{-1/3}^{(2)}(2\eta^3/3) e^{i\pi/6} - \theta(-\eta) H_{-1/3}^{(1)}(-2\eta^3/3) e^{-i\pi/6} \right\} - 4i\eta \beta^{4/3} e^{iM} e^{\frac{2i}{3}\eta^3} \sum_{n=-\infty}^\infty \frac{i^n J_n(2\eta^3/3)}{9n^2 - 1}. \quad (10)$$

Пренебрегая малой величиной деформационного фона $4\beta \exp(-\pi/(8\beta))$, видим, что интенсивность чисто деформационной части, определяемая квадратом модуля (10), есть выражение вида $\beta^{8/3} F(\beta^{2/3} M/2)$. Это значит, что профиль вычисленного вклада имеет при $\beta \ll 1$ для разных радиусов изгиба единую форму. С изменением кривизны кристалла этот профиль будет относим к прямоугольным осям изменяющегося масштаба. Рассчитываемый вклад содержит разрыв в начале координат за счет слагаемых с θ -множителями в (10) и осцилляции при больших значениях аргумента ввиду присутствия ряда по функциям Бесселя. На рис.3, как функция аргумента M , представлена величина $|I(M, |\nu| = 15)|^2$ - профиль интенсивности чисто деформационной добавки, характеризующей вклад, обусловленный волноводным эффектом. Кривые на рис.4 описывают пространственные распределения суммарной интенсивности фокусировки симметричного отражения (111) на длине волны линии CuK_α , вычисленной на основе амплитуды (7), для нескольких значений радиуса изгиба пластины кремния. Всюду по оси абсцисс откладывается величина пространственного отклонения в масштабе $\times 7 \cdot 10^{-4}$ см. Центральный пик формируется дифракционным вкладом, определяемым первым слагаемым в (7), которое в начале координат достигает максимума, на всех графиках равного 0,25. Видно, что вычисленная здесь волноводная компонента приводит вообще к уширению пространственного профиля фокуса. При уменьшении радиуса изгиба до

значений, когда используемое здесь приближение перестает выполняться, дисперсии профилей дифракционной и деформационной компонент начинают сравниваться ($\beta \sim 1$), а величина последней будет существенно увеличивать общую интенсивность. На рис.5 представлены угловые профили интенсивности в фокусе при ряде радиусов изгиба. В осях, переведенных из угловых переменных в энергетические, данная кривая будет описывать спектральное распределение интенсивности в окрестности брэгговского значения длины волны для данного отражения.

4 Обсуждение

В данной работе количественно выражен вклад в дисперсию, обусловленный деформацией отражающей среды. Проведенные вычисления позволяют понять характер влияния деформационных свойств кристалла на параметры фокусного изображения, которое этим кристаллом формируется. Волноводный эффект, который с уменьшением радиуса изгиба кристалла приводит к уширению кривой качания [11] и росту интегральной интенсивности [12], обуславливает при не слишком малых радиусах также уширение фурье-образа этой кривой, который количественно описывает пространственно-спектральное распределение интенсивности в фокусе. Для рассматриваемого в работе отражения $Si(111)$ при радиусах изгиба $\sim 3\text{м}$ и более вклад волноводного эффекта оказывается мал и профиль хорошо описывается дифракционной составляющей.

Деформационный параметр β при изгибе пластины кристалла с центральной плоскостью, совпадающей с плоскостью отражения, имеет вид

$$\beta = \frac{\pi}{2} \frac{1}{Rd} \left[1 + (a_{13}/a_{11} - 1) \frac{\lambda^2}{4d^2} \right] \frac{V_0^2}{r_0^2} \frac{1}{\lambda^2 |F_h|^2},$$

где d — межплоскостное расстояние, a_{13}, a_{11} — компоненты тензора обратных модулей упругости, V_0 — объем ячейки, r_0 — классический радиус электрона, F_h — структурный фактор кристалла. Этот параметр существенно зависит от длины волны, вещества кристалла, индексов отражения. Отношение a_{13}/a_{11} также является функцией λ , индексов плоскости и ее угла асимметрии. Так χ_h может принимать значения от $7 \cdot 10^{-7}$ для $Si(333)$ при $\lambda = 0,56\text{Å}$ до $21,3 \cdot 10^{-6}$ для $Ge(220)$ при $\lambda = 1,54\text{Å}$. Поэтому границы применимости результатов приводимых вычислений по величине радиуса изгиба могут сильно отличаться для разных условий отражения. Для приведенных двух (симметричных) отражений областями применимости подхода будут $R > 8\text{м}$ и 6см соответственно. Это означает, что чем выше отражательная способность кристалла (Ge), тем точнее интенсивность фокусирующегося излучения будет описываться в приближении плоского кристалла и тем более высокое спектральное разрешение будет обеспечено. С уменьшением величины восприимчивости данного отражения (Si) деформация кристалла при реализуемых радиусах изгиба будет все активной

влиять на значение интенсивности в каустике. При больших значениях восприимчивости интенсивность будет определяться не более чем дифракционной компонентой почти при всех радиусах изгиба и за счет деформации ее увеличить нельзя.

О спектральном распределении интенсивности в фокусе в данном рассмотрении мы говорим в смысле зависимости от малого отклонения длины волны $\lambda - \lambda_0$ (λ_0 — значение, соответствующее выполнению условия Брэгга) при неизменном угле падения плоской волны. Ширина этого распределения определяет спектральное разрешение установки, действие которой основано на описываемом процессе. Его величина может достигать значений 10^{-7} , а для используемого в работе примера симметричного кремниевго рефлекса ($R = 3\text{м}$) имеем

$$\frac{\Delta\lambda}{\lambda} = \frac{2}{\pi} \frac{\lambda \cot \theta}{R \chi_h} = 1,4 \cdot 10^{-5}.$$

Данное выражение для разрешения справедливо при $R > 3\text{м}$. и определяется только дифракционным вкладом. С уменьшением радиуса изгиба деформационное слагаемое в (7) станет сравниваться с дифракционным, интенсивность станет существенно возрастать, а спектральное разрешение будет падать. Относительно углового распределения интенсивности (рис.5) выясняется, что зависимость вычисляемой поправки от угла качания чрезвычайно слаба в сравнении с угловой зависимостью дифракционной компоненты. Влияние деформационной компоненты выражается лишь в слабом деформационном фоне разной величины по разные стороны от начала координат ввиду разрывности функции, описывающей эту компоненту.

5 Сравнение с измерениями

Опытные данные по измерению пространственного профиля в фокусе были получены недавно на источнике ВМ5 в ESRF [15]. Из коллимированного пучка при помощи фильтрующего зеркала выделялась нужная гармоника рентгеновского диапазона и направлялась на линзу Брэгга-Френеля (BFL). Фокусный профиль измерялся через маску в виде отверстия в 1мкм . Снятое двумерное пространственное распределение приведено на рис.6. Ввиду того, что профиль фиксировался с учетом аппаратурной конволюции, сравнение с представляемыми расчетами может быть проведено приближенное. Тем не менее характер асимметрии, фоновый деформационный вклад и значение пространственной дисперсии ($\sim 25\text{мкм}$) хорошо согласуются с полученными в данной работе (рис.4 при $R = 2,12\text{м}$).

Что касается имеющихся экспериментальных данных по фокусирующей рентгенооптике изогнутых кристаллов в целом, то их можно разделить на измерения кривой качания и интегральной интенсивности как функций радиуса изгиба. Для качественной поддержки полученных в работе данных могут быть

привлечены лишь последние, т. к. съемка интенсивности в них пространственно независима. Поскольку начало существенного влияния деформации сильно зависит от длины волны и индексов дифракции, то это должно быть видно по положению кривой зависимости интенсивности $I(R)$ от радиуса изгиба R относительно начала координат. На рис.7а приведены соответствующие кривые, полученные в работе [14], которые показывают, что значение радиуса, минуя которое $I(R)$ начнет возрастать, тем больше, чем короче длина волны (MoK_α в сравнении с CuK_α) и меньше восприимчивость отражения (плоскость (101) кварца в сравнении с (111) германия). Систематический сдвиг интенсивности с изменением λ особенно наглядно виден в измерениях [11] (рис.7б).

6 Заключение

В работе развивается формализм, описывающий специфический случай дифракционной фокусировки монохроматической рентгеновской плоской волны — фокусировку слабоизогнутым кристаллом. Подобный случай реализуется в типичных экспериментальных условиях энергодисперсионных установок для измерения тонкой структуры спектров поглощения в конденсированных средах. При этом слабый изгиб фокусирующего кристалла обеспечивает малый размер области полихроматического фокуса, необходимый для измерений на микрообразцах, что обуславливает интерес к данной задаче. Выяснение спектрального и пространственного профилей интенсивности именно в фокусе продиктовано тем, что их дисперсии являются источниками аппаратных погрешностей в измерениях коэффициентов поглощения на образце, расположенном в этом фокусе.

Определен характер возникновения влияния деформации на дифракционный фокус в брэгговской геометрии. Действие деформации становится существенным при тем больших радиусах изгиба, чем короче длина волны излучения и меньше динамическая восприимчивость кристалла на этой длине. При этом более существенное изменение испытывает пространственный профиль интенсивности в сравнении с угловым распределением, которое приобретает лишь небольшой деформационный фон. Поскольку деформация приводит к увеличению пространственно-угловой дисперсии фокального профиля, можно указать, что в целях уменьшения последних необходимо прибегать к использованию кристаллов с наибольшей рентгеновской восприимчивостью на данной длине волны. Результаты экспериментальных измерений хорошо подтверждают детали поведения распределения интенсивности, рассчитанные в данной работе, и вывод о существовании связи деформационной аберрации рентгенооптической системы с отражательной способностью кристалла, который в ней используется.

Авторы благодарны И. Н. Иванову за замечания, высказанные по содержанию работы.

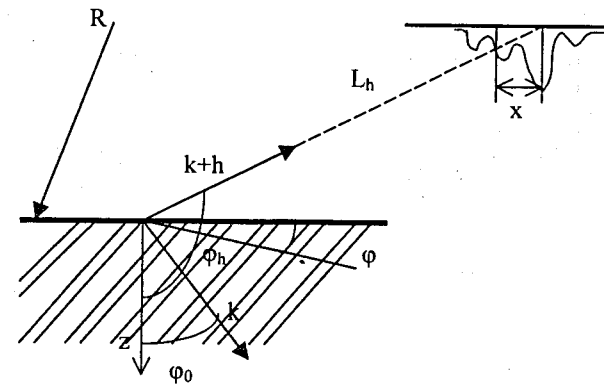


Рис. 1 Кинематика брэгговской фокусировки

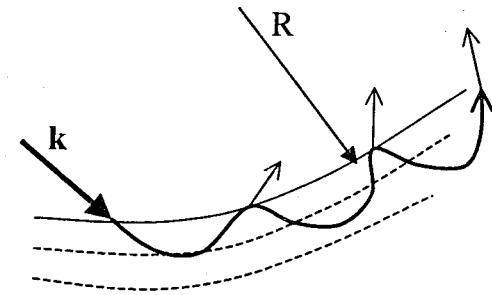


Рис. 2 Волноводный эффект

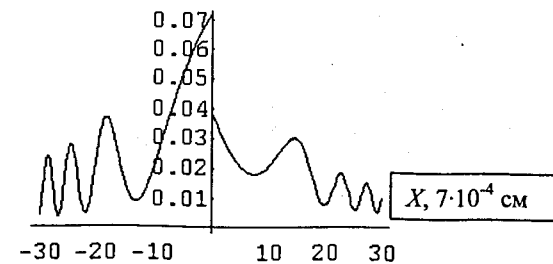


Рис. 3 Профиль интенсивности деформационной добавки

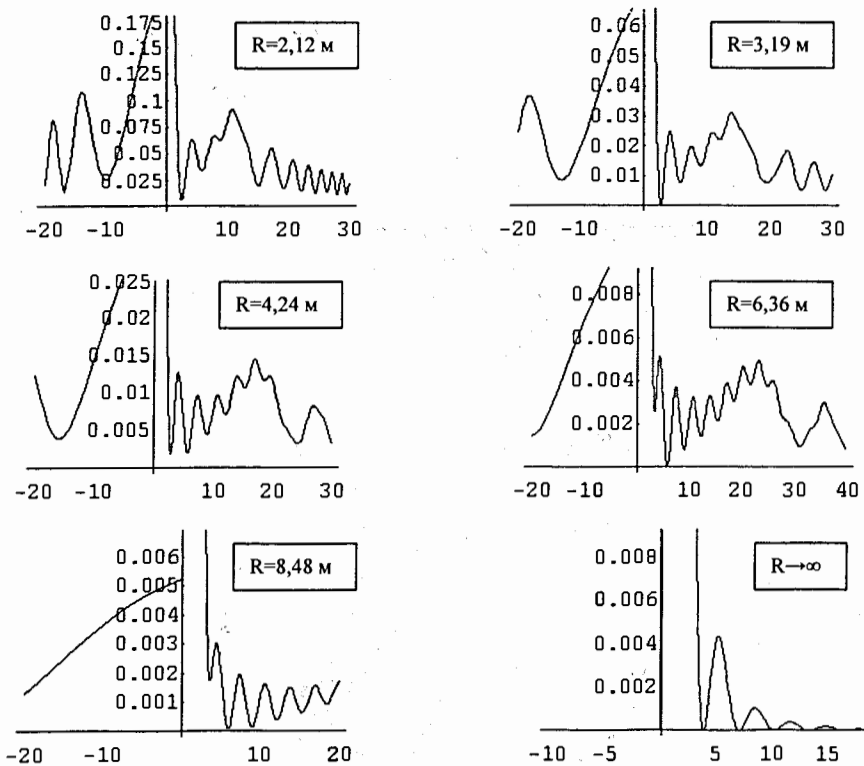


Рис. 4 Пространственные профили интенсивности при дифракционной фокусировке для разных радиусов изгиба. Масштаб по оси абсцисс $7 \cdot 10^{-4}$ см

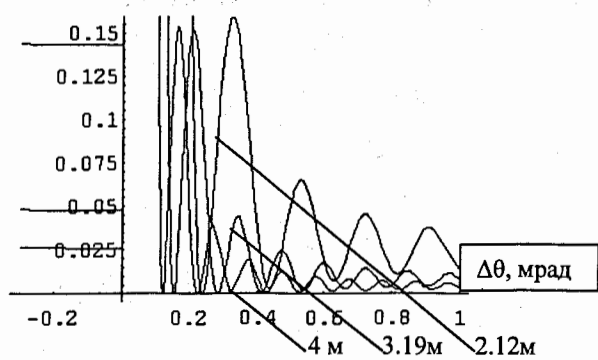


Рис. 5 Угловые спектры в фокусе

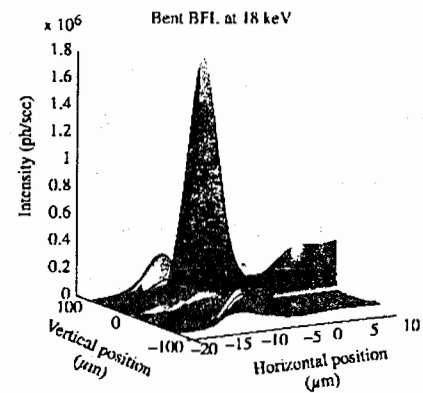


Рис. 6 Экспериментальный пространственный профиль

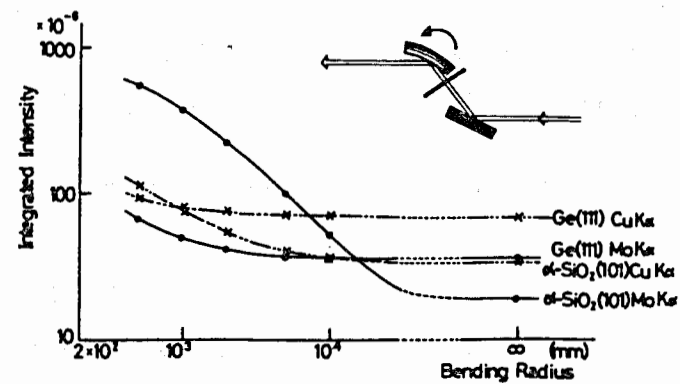


Рис. 7а Измерения зависимости интегральной интенсивности от радиуса изгиба для германия и кварца на линиях меди и молибдена

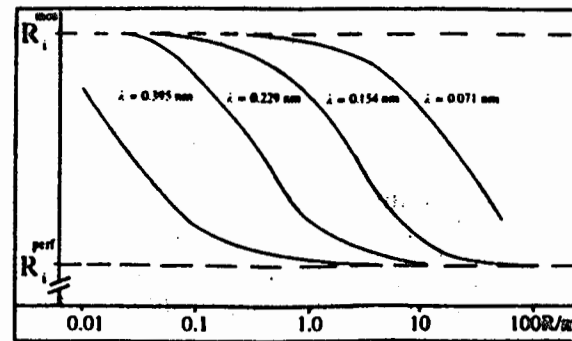


Рис. 7б Измерения энергетического сдвига профиля интегральной интенсивности

Литература

- [1] Tolentino H., Dartyge P., Fontane A. et al. // J. Appl. Cryst. 1988. V. 21. P. 15.
- [2] Gyngazov L. N., Tiutiunnikov S. I. // JINR Preprint. 1997. E14-97-332.
- [3] Габриэлян К. Т., Чуховский Ф. Н., Пинскер З. Г. // ЖТФ. 1980. V. 50. P. 3.
- [4] <http://www.esrf.fr/machine/myweb/machine/brill.html>
- [5] Hagelstein M., Ferrero C., Sanchez del Rio M. et al. // Physica B. 1995. V. 208. P. 223.
- [6] Chukhovskii F. N., Gabrielyan K. T., Petrashen' P. V. // Acta Cryst. A. 1978. V.34. P. 610.
- [7] Chukhovskii F. N., Malgrange C. // Acta Cryst. A. 1989. V. 45. P. 732.
- [8] Чуховский Ф. Н. // Металлофизика. 1981. V. 3. P. 3.
- [9] Бейтмен Г., Эрдейи А. Высшие трансцендентные функции. М.: ГИФМЛ, 1965. Т. 1, 2.
- [10] Лебедев Н. Н. Специальные функции и их приложения. М.: ГИФМЛ, 1963.
- [11] Uschmann I., Forster E., Gabel K. // J. Appl. Cryst. 1993. V. 26. P. 405.
- [12] Kalman Z., Weissmann S. // J. Appl. Cryst. 1983. V. 16. P. 295.
- [13] Boeuf A., Melone S., Puliti P. et al. // Appl. Cryst. 1978. V. 11. P. 265.
- [14] Khora K., Ando M., Matsushita T. et al. // Nucl. Instrum. Methods. 1978. V. 152. P. 161.
- [15] Freund A. K., Souvorov A. <http://www.esrf.fr/info/science/highlights/95-96/Xray/fig96.htm>

Рукопись поступила в издательский отдел
19 октября 1999 года.