

43

И Н С Т И Т У Т
ЯДЕРНОЙ ФИЗИКИ СОАН СССР

ПРЕПРИНТ И ЯФ 77-61

А.А.Вазина, Ю.Б.Владимирский, В.С.Герасимов,
М.Т.Коган, Б.Я.Сонькин, М.А.Шеромов

КРИСТАЛЛ - ДИФРАКЦИОННЫЕ РЕНТГЕ -
НООПТИЧЕСКИЕ СХЕМЫ МОНОХРОМА -
ТИЗАЦИИ СИНХРОТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

Новосибирск

1977

Кристалл-дифракционные рентгенооптические схемы
монохроматизации синхротронного излучения

Вазина А.А., Владимирский Ю.Б., Герасимов В.С.,
Коган М.Т., Сонькин Б.Я., Шеромов М.А.

В статье выводятся выражения, описывающие пространственно-энергетическое преобразование пучков полихроматического рентгеновского излучения широкого спектрального состава в кристалл-дифракционных рентгенооптических схемах с плоскими и изогнутыми кристаллами-монохроматорами с учетом особенностей передаточной функции реальных монокристаллов. На основании анализа полученных выражений предлагаются варианты оптимальных схем монохроматизации синхротронного излучения для использования в малоугловых исследованиях. Приводятся результаты экспериментальной проверки полученных выражений.

Повышение скорости съемки рентгенограмм часто является важной методической задачей рентгеновского эксперимента, в том числе при малоугловых исследованиях. Рентгенооптическая схема должна обеспечить наибольшую светосилу при заданной угловой разрешающей способности (УРС) /25/. С этой целью используют острофокусные источники, обладающие высокой яркостью, и фокусирующие рентгенооптические схемы с большими угловыми апертурами /27/. Новое возможности открывает применение мощного рентгеновского синхротронного излучения (СИ) /8,13,33/. Его яркость может на несколько порядков превосходить яркость лучших рентгеновских трубок с вращающимся анодом /32,33/.

Свойства СИ подробно описаны в работах /5,11,15,19/. СИ обладает широким спектральным составом с полушириной спектрального распределения порядка длины волны спектрального максимума. Поэтому применение СИ для большинства дифракционных экспериментов возможно лишь при его монохроматизации, а рентгенооптические схемы должны учитывать специфику источника СИ. Вопросы рентгеновской оптики для использования СИ в малоугловых исследованиях вкратце рассмотрены в работах /8,26,31,35/, где предлагаются кристалл-дифракционные схемы монохроматизации с использованием плоских /8/ и изогнутых асимметричных /26,31,35/ монокристаллов. В статье /37/ подробно обсуждаются различные рентгенооптические схемы и кристаллы-монохроматоры для обычных источников характеристического излучения — рентгеновских трубок. Однако в литературе отсутствует систематическое описание особенностей рентгенооптических схем монохроматизации СИ.

В настоящей работе проводится рассмотрение кристалл-дифракционных

рентгенооптических схем монохроматизации СИ, и предлагаются методы выбора оптимальных схем монохроматизации для малоугловых исследований.

Пространственно-энергетическое преобразование пучка СИ на кристалл-дифракционном диспергирующем элементе

Анализ рентгенооптических схем монохроматизации СИ возможен на основании выражений, описывающих пространственно-энергетическое преобразование пучка СИ при монохроматизации. Типичная схема монохроматизации с изогнутым асимметричным кристаллом-монохроматором на отражение представлена на рис. I.

Спектрально-угловое распределение потока СИ электрона с энергией E_e , вращающегося по орбите радиуса ρ , составляет

$$I(\varphi, \lambda) = \frac{27}{32\pi^3} \frac{e^2 \tau}{\rho^3} t^4 \gamma^8 (1 + \tau^2)^2 (K_{2/3}^2(\delta) + \frac{\tau^2}{1 + \tau^2} K_{1/3}^2(\delta)) \quad (1)$$

где K_a - функция Макдональда порядка a и $\lambda_c = \frac{4\pi\rho}{3} \gamma^{-3}$, $\gamma = \frac{E_e}{mc^2}$, $t = \frac{\lambda_c}{\lambda}$, $\tau = \gamma \varphi$, $\delta = \frac{1}{2} t(1 + \tau^2)^{3/2}$ для излучения длины волны λ , распространяющегося под углом φ к плоскости электронной орбиты /19/. В проекции на плоскость электронной орбиты излучение равномерно распределено по всеорасательных к этой орбите. Вертикальные и горизонтальные бетатронные колебания приводят к размытию электронного пучка независимо по координатам x и y (см. рис. I), так что плотность вероятности прохождения электроном точки (x, y) поперечного сечения z_e пучка определяется соответствующими плотностями вероятности $Q_x(x)$ и $Q_y(y)$ /11, 15/.

Поэтому для спектральной плотности яркости^{x)} СИ $B_e(x, y, \varphi, \lambda)$ в поперечном сечении z_e электронного пучка при электронном токе i можно записать:

$$B_e(x, y, \varphi, \lambda) = Q_x(x) Q_y(y) I(\varphi, \lambda) \frac{P}{ec} i \quad (2)$$

Ввиду конструктивных особенностей синхротронов и по соображениям радиационной безопасности расстояние от источника излучения до места расположения рентгеновских установок составляет от нескольких метров до нескольких десятков метров. Соответственно угловая расходимость пучка СИ оказывается незначительной как в горизонтальной плоскости электронной орбиты yz , где пучок формируется коллимационной системой в небольшом интервале углов α вблизи оси z , так и в вертикальной плоскости xz , где помимо коллимационной системы расходимость ограничена также ввиду релятивистского сжатия СИ вблизи плоскости электронной орбиты, то есть выполняются условия параксиальности пучка СИ. Пропускание коллимационной системы, как и яркость источника СИ, обычно можно разложить на независимые составляющие $\Phi_y(y, \alpha, \lambda)$ и $\Phi_x(x, \varphi, \lambda)$ в горизонтальной и вертикальной плоскостях соответственно.

Нормаль к рабочей поверхности \vec{n}_c и вектор обратной решетки \vec{h}_c рабочей системы отражающих плоскостей кристалла-монохроматора располагают, как правило, в плоскости электронной орбиты, что позволяет собрать всю измерительную схему в горизонтальной плоскости, хотя и ограничивает выбор кристаллов малыми или очень большими углами дифракции монохроматизируемого излучения, так как дифракция под промежуточными углами приводит к значительной потере эффективности кристаллов из-за высокой степени поляризации СИ в горизонтальной плоскости.

Для уменьшения радиационной нагрузки исследуемый образец располагается в монохроматизированном пучке, хотя принципиально возможна

x) В работе используется терминология по фотометрическим величинам, принятая в книге /1/.

и установка в первичный пучок, предложенная в работе /30/ с целью повышения УРС: Плоскость регистрации W_d располагается перпендикулярно направлению оси W , соответствующему углу отклонения на кристалле-монохроматоре некоторого спектрального компонента λ_0 дифрагировавшего излучения.

Выражения, описывающие преобразование рентгеновского пучка монохроматором, должны учитывать особенности дифракционного отражения на реальном кристалле, обладающем более или менее развитой субструктурой. Наиболее полно рентгенооптические свойства кристалла могут быть охарактеризованы с помощью передаточной функции $F(\bar{k}_0, \bar{k}_h) = \frac{J(\bar{k}_h)}{W(\bar{k}_0)}$, которая является обобщением характеристической функции, введенной в работе /34/ и связывает силу света $J(\bar{k}_h)$ в потоке излучения, рассеянного в направлении \bar{k}_h , с потоком излучения $W(\bar{k}_0)$, падающим на кристалл в направлении \bar{k}_0 . В совершенном кристалле каждому падающему лучу отвечает единственный отраженный луч, лежащий в плоскости дифракции. Их интенсивности связаны коэффициентом отражения $T(\eta_0, b)$; а направление дифрагированного луча ϑ_2 зависит от коэффициента асимметрии кристалла b и угла отклонения $\eta_0 = \vartheta_1 - \vartheta_\lambda$ луча, падающего в направлении ϑ_1 ; от значения угла Брегга ϑ_λ для данной длины волны λ /14/: $\eta_h = \vartheta_2 - \vartheta_\lambda = b\eta_0$. Для мозаичных кристаллов с большой угловой разориентацией ϵ отдельных областей когерентного рассеяния (ОКР) передаточная функция с достаточной точностью определяется угловым распределением ОКР $A(\epsilon)$.

Усредняя, как обычно, размеры и форму ОКР /7, 38/, в первом приближении можно считать, что отражательная способность ряда кристаллов определяется функцией распределения $A(\epsilon)$ по углам ϵ разориентации ОКР и средним коэффициентом отражения отдельных ОКР $T(\eta_0, b)$, зависящим от конкретного значения угла падения излучения на ОКР и среднего коэффициента асимметрии ОКР- b . На рис.2 показана дифракция излучения на отдельной ОКР, вектор обратной решетки которой \bar{h}_r разориентирован

относительно среднего по ОКР вектора обратной решетки \bar{h}_c кристалла на углы ξ и ζ в горизонтальной и вертикальной плоскостях соответственно.

Проектируя условия Лауэ $\bar{k}_h - \bar{k}_0 = \bar{h}_r$ для данной ОКР на направлении нормали к плоскости электронной орбиты, можно записать: $\frac{1}{\lambda}(\sin\psi - \sin\varphi) = \frac{1}{d}\sin\xi$, где d - межплоскостное расстояние, или ввиду малости углов φ и ξ : $\psi = \varphi + 2\xi \sin\vartheta_\lambda$. Используя условия отражения для данной ОКР в плоскости электронной орбиты, можно записать с точностью до бесконечно малых 2-го порядка по φ и ψ : $\eta_h = b\eta_0 + \xi(b+1)$. Поэтому передаточная функция принимает вид

$$F(\bar{k}_0, \bar{k}_h) \equiv F_\lambda(\eta_0, \varphi, \eta_h, \psi) = \frac{R}{2(b+1)\sin\vartheta_\lambda} A\left(\frac{\eta_h - b\eta_0}{b+1}\right) T\left(\frac{\eta_h + \eta_0}{b+1}\right) A\left(\frac{\psi - \varphi}{2\sin\vartheta_\lambda}\right) \quad (3)$$

где R - нормирующий множитель при условии нормировки распределений $A(v)$ и $T(v)$ на единицу.

Другие рентгенооптические характеристики кристалла могут быть легко выведены из его передаточной функции. Коэффициент отражения $P(\eta_0)$ составляет

$$P(\eta_0) = \int F_\lambda d\eta_h d\psi = \frac{R}{b+1} \int A\left(\frac{\eta_h - b\eta_0}{b+1}\right) T\left(\frac{\eta_h + \eta_0}{b+1}\right) d\eta_h, \quad (4)$$

а интегральное отражение есть $\int F_\lambda d\eta_h d\psi d\eta_0 = R$. В дальнейшем в работе часто встречаются однократные и многократные интегралы типа (4). Преобразование и оценка параметров распределений общего вида $F(x_n) = \int \prod_{i=1}^n f_j(a_j x_i + b_j) \prod_{k=1}^{n-1} dx_k$, где $i \leq n$, приведены в приложении. Выражение (3) совпадает в асимптотах с формулами для совершенного и мозаичного с большой угловой разориентацией кристаллов. Коэффициенты отражения ОКР и их угловая разориентация могут быть оценены на основании моделей Дарвина /7/ или Захариазена /38/.

Разложение энергетических характеристик пучка СИ и передаточной функции кристалла-монохроматора на независимые составляющие в гори-

горизонтальной и вертикальной плоскостях позволяет независимо рассматривать преобразование пучка в горизонтальном и вертикальном сечениях рентгенооптической схемы.

Распределение в горизонтальной плоскости. На рис.3 изображено сечение схемы монохроматизации плоскостью электронной орбиты. Центральный луч z падает на поверхность кристалла под углом ψ_0 к ней и под углом ϑ_0 к атомным плоскостям, а центральный дифрагированный луч w составляет угол $2\vartheta_0$ с падающим и угол ψ_h с поверхностью кристалла. Радиус кривизны кристалла r можно считать постоянным в пределах малого освещенного участка его поверхности.

Задаваясь распределением спектральной плотности яркости первичного пучка $B_z(x, y, \varphi, \alpha, \lambda) = B_{zy}(y, \alpha, \lambda) \delta(x, \varphi)$ в поперечном сечении z , для которого угловая апертура кристалла невелика и полагая, что передаточная функция кристалла имеет вид: $F_\lambda(\eta_0, \varphi, \eta_h, \psi) = F_{\lambda y}(\eta_0, \eta_h) \delta(\psi - \varphi)$ можно определить спектральную плотность яркости дифрагированного пучка $B_w(u, v, \psi, \beta, \lambda) = B_{wv}(v, \beta, \lambda) \delta(u, \psi)$ в поперечном сечении w , для которого угловая апертура кристалла также мала. Здесь

$B_{wv}(v, \beta, \lambda) = b \int B_{zy}(b(\beta w - v) - z\alpha, \alpha, \lambda) F_{\lambda y}(D\Delta\lambda - \frac{\beta w - v}{2f_2} + \alpha, D\Delta\lambda + \frac{\beta w - v}{2f_2} - \beta) d\alpha$,
 $D = \tan \vartheta_0 / \lambda_0$ - угловая дисперсия рентгенооптической схемы для длины волны λ_0 , $\Delta\lambda = \lambda - \lambda_0$, и введены обозначения $f_1 = \frac{r}{2} \sin \psi_0$ и $f_2 = \frac{r}{2} \sin \psi_h$ - фокусные расстояния кристалла со стороны падающего и дифрагированного пучков соответственно, так что $b = f_1 / f_2$.

Для излучения длины волны λ и кристалла, отражающего строго в соответствии с уравнением Брэгга $F_{\lambda y} = R \delta(\eta_0, \eta_h)$, каждая точка y в сечении z оказывается связанной с единственной точкой $v = y \frac{2f_2 - w}{2f_1 - z} - D\Delta\lambda (z(2f_2 - w) + w(2f_1 - z))$ в сечении w лучом, падающим на кристалл в точке $\chi = \frac{y - z D\Delta\lambda}{2f_1 - z}$ под углом $\alpha = \frac{2f_1}{2f_1 - z} D\Delta\lambda - \frac{y}{2f_1 - z}$ к оси z и отражающимся под углом $\beta = \frac{2(z - f_1)}{2f_1 - z} D\Delta\lambda - \frac{y}{2f_1 - z}$ к оси w . Для СИ можно пренебречь изменением спектральной плотности яркости в диапазоне

длины волн, дифрагирующих на кристалле-монохроматере в пределах малой угловой апертуры падающего пучка: $B_z(\lambda) = B_z(\lambda_0)$. Для проекции на горизонтальную плоскость $B_{wv}(v, \beta)$ яркости дифрагированного пучка в сечении w , связанном с сечением падающего пучка z соотношением

$$\frac{f_1}{z} + \frac{f_2}{w} = 1 \quad (5)$$

можно получить, используя приложение:

$$B_{wv}(v, \beta) = b \int B_{zy} F_{\lambda y} d\alpha d\lambda = \frac{bR}{D} B_{zy}(v/M, \beta \frac{w - f_2}{f_2} - \frac{v}{f_2}, \lambda_0) \quad (6)$$

где $M = \frac{dv}{dy} = \frac{w}{z}$ - коэффициент поперечного увеличения.

В полихроматическом пучке плоскость регистрации w оказывается оптически сопряженной плоскости виртуального источника z , и в плоскости регистрации наблюдается сфокусированное полихроматическое изображение виртуального источника. Выражения аналогичные (6) получаются, очевидно, и для связи других энергетических характеристик в плоскости регистрации с их спектральными плотностями в плоскости виртуального источника. Так проекция освещенности $E_{wv}(v)$ определяется проекцией спектральной плотности освещенности $\mathcal{E}_{zy}(y, \lambda)$

$$E_{wv}(v) = \frac{R}{M D} \mathcal{E}_{zy}(v/M, \lambda_0), \quad (7)$$

а поток дифрагированного излучения W_v спектральной плотностью потока $\mathcal{W}_y(\lambda)$

$$W_v = \frac{R}{D} \mathcal{W}_y(\lambda_0) \quad (8)$$

В свою очередь распределения спектральных плотностей яркости B_z освещенности \mathcal{E}_z и потока \mathcal{W}_z пучка СИ в плоскости виртуального источника $z = z_e$ определяются распределением яркости СИ в поперечном сечении электронного пучка z_e перпендикулярном центральному лучу и пропусканием коллимационной системы

$$B_z(x, y, \varphi, \alpha, \lambda) = B_e(x + (z_e - z_c)\varphi, y + (z_e - z_c)\alpha, \varphi, \alpha, \lambda) \Phi_x(x, \varphi, \lambda) \omega_y(y, \alpha, \lambda) \quad (9)$$

и соответствующими интегралами

$$\mathcal{E}_z(x, y, \lambda) = \int B_z d\alpha d\varphi \quad (10)$$

$$\mathcal{W}_z(\lambda) = \int B_z d\alpha d\varphi dx dy \quad (11)$$

Сечение первичного пучка $z=2f_1$ оказывается выделенным, поскольку для каждой точки y излучение длины волны $\lambda = \lambda_0 + \frac{y}{2f_1 D}$ дифрагирует на кристалле при всех углах α в пределах угловой апертуры системы и фокусируется в плоскости $w=2f_2$, то есть осуществляется монохроматическая фокусировка по Иоганну /24/. Таким образом распределение $\mathcal{W}_V(\lambda)$ спектральной плотности потока дифрагированного ИИ задается распределением спектральной плотности освещенности в сечении первичного пучка $z=2f_1$

$$\mathcal{W}_V(\lambda) = E_{2f_2 V} \mathcal{V}'_{\lambda} = 2f_1 R \mathcal{E}_{2f_1 y}(2f_1 D \Delta \lambda, \lambda_0) \quad (12)$$

Дополнительное уширение распределения освещенности в плоскости регистрации, связанное с конечной шириной спектрального состава дифрагированного ИИ, максимально при расположении исследуемого объекта непосредственно за кристаллом-монохроматором. В этом случае, полагая спектральный состав монохроматизированного пучка одним и тем же в каждой точке плоскости регистрации, можно оценить сверху распределение освещенности E_{wvd} в дифрагированном на объекте пучке

$$E_{wvd} \sim \int E_{wv}(v_d + D_0 \Delta \lambda w) \mathcal{W}_V(\lambda) d\lambda = 2f_1 R \int E_{wv}(v_d + D_0 \Delta \lambda w) \mathcal{E}_{2f_1 y}(2f_1 D \Delta \lambda, \lambda_0) d\lambda \quad (13)$$

где v_d - координата в плоскости регистрации, соответствующая углу дифракции φ_0 излучения длины волны λ_0 монохроматизированного луча, проходящего через точку v . $D_0 = \varphi_0 / \lambda_0$ - угловая дисперсия этого излучения на объекте. "Размытие" каждой точки дифрагированного на объекте излучения подобно распределению освещенности монохроматизированного пучка, но в $\frac{D_0 w}{2f_1}$ раз уже и при малых углах исследования может не учитываться при не слишком большом отношении $w/2f_1$.

Наличие у реальных кристаллов-монохроматоров передаточной функции конечной ширины приводит к появлению в плоскости регистрации пятна засветки конечного размера даже для точечного виртуального источника $\mathcal{B}_{zy}(y, \alpha, \lambda) = \mathcal{I}_s(\lambda) \delta(y - y_0)$, расположенного в точке y_0 . В случае совершенного кристалла ($A(\epsilon) = \delta(\epsilon)$) и в случае мозаичного кристалла

с узкой дифракционной картиной ОКР ($T(\epsilon) = \delta(\epsilon)$) распределение освещенности в плоскости регистрации имеет вид $E_{wv}(v) = \frac{L_{\epsilon}}{q w} T\left(\frac{y_0 M - v}{q w}\right)$, где $L_{\epsilon} = \frac{R}{D} \mathcal{W}_s(\lambda_0)$ и $\mathcal{W}_s(\lambda) = \mathcal{I}_s(\lambda) \alpha_0$, α_0 - угловая апертура схемы, q равно $|1-b|$ для совершенных и 2 для мозаичных кристаллов.

Для практических целей определения УРС схемы монохроматизации ширину пятна засветки можно характеризовать среднеквадратическим отклонением (СКО) распределения освещенности σ_{wv} или его полушириной Ω_{wv} . Для реального кристалла-монохроматора с передаточной функцией вида (3) и виртуального источника, имеющего СКО и полуширину распределения освещенности σ_{zy} и Ω_{zy} соответственно, оказывается согласно приложению

$$\sigma_{wv}^2 = \sigma_g^2 + \sigma_c^2 \quad (14.1)$$

где $\sigma_g = M \sigma_{zy}$ и $\sigma_c = ((1-b)^2 \sigma_T^2 + 4 \sigma_A^2)^{1/2} w$ - СКО, обусловленные геометрией схемы монохроматизации и рентгенооптическими свойствами кристалла-монохроматора соответственно. σ_T и σ_A - СКО распределений $T(\epsilon)$ и $A(\epsilon)$ соответственно. Полуширину распределения освещенности можно оценить с помощью аналогичного выражения:

$$\Omega_{wv}^2 = \Omega_g^2 + \Omega_c^2 = M^2 \Omega_{zy}^2 + ((1-b)^2 \Omega_T^2 + 4 \Omega_A^2) w^2 \quad (14.2)$$

Смысл индексов ясен из предыдущего.

Воспользовавшись приложением, для проекции освещенности в максимуме дифрагированного пучка E_{mv} на горизонтальную плоскость можно записать

$$E_{mv} = 0.4 \frac{W_v}{\sigma_{wv}} = 0.9 \frac{W_v}{\Omega_{wv}} \quad (15)$$

Распределение в вертикальной плоскости. Ввиду очень малой расходимости пучка ИИ в вертикальной плоскости обычно осуществляется фокусировка его с помощью зеркал полного внешнего отражения /26,31/ при работе по схеме Хаксли /27/, или удовлетворяется одним кристаллом-монохроматором и фокусировкой в горизонтальной плоскости /13/.

В последнем случае в плоскости регистрации w распределение освещенности пятна засветки по вертикали $E_w(u, v) = E_{wu}(u) \delta(v)$ определяется составляющими $Q_x(x)$ и $I(\varphi, \lambda)$ спектральной плотности яркости $B(x, y, \varphi, \alpha, \lambda) = Q_x(x) I(\varphi, \lambda) \delta(y, \alpha) \frac{P}{ec} i$ источника (2), функцией пропускания $\Phi_x(x, \varphi, \lambda)$ коллимационной системы в вертикальной плоскости и передаточной функцией $F_{\lambda x}(\eta_0, \varphi, \eta_h, \psi) = F_{\lambda x}(\varphi, \psi) \delta(\eta_h)$ кристалла-монокроматора и практически не зависит от его кривизны.

С учетом слабой зависимости $I(\varphi, \lambda)$ от длины волны в пределах малого спектрального диапазона дифрагированного излучения и при отсутствии коллимации пучка в вертикальной плоскости, $\Phi_x = 1$, можно записать (см. рис. I):

$$E_{wu}(u) = \frac{P i}{2 ec \sin \vartheta_0} \int Q_x(x - \varphi z_e - \psi w) I(\varphi, \lambda_0) A\left(\frac{\psi - \varphi}{2 \sin \vartheta_0}\right) d\varphi d\psi, \quad (I6)$$

где на основании выражения (3) подставлено $F_{\lambda x}(\varphi, \psi) = \frac{1}{2 \sin \vartheta_0} A\left(\frac{\psi - \varphi}{2 \sin \vartheta_0}\right)$. С помощью приложения можно оценить СКО σ_{wu} и полуширину Ω_{wu} пятна засветки в вертикальной плоскости

$$\sigma_{wu}^2 = \sigma_x^2 + (w + z_e)^2 \sigma_\varphi^2 + (2w \sin \vartheta_0)^2 \sigma_A^2 \quad (I7.1)$$

или, как при переходе от (I4.1) к (I4.2)

$$\Omega_{wu}^2 = \Omega_x^2 + (w + z_e)^2 \Omega_\varphi^2 + (2w \sin \vartheta_0)^2 \Omega_A^2 \quad (I7.2)$$

где σ_x и Ω_x , σ_φ и Ω_φ - СКО и полуширины распределений по вертикали плотности электронного пучка и спектральной плотности силы света

$I(\varphi, \lambda_0) \frac{P}{ec} i$ вращающегося электрона соответственно.

При дифракции на исследуемом объекте в вертикальном направлении появится дополнительное уширение, связанное с конечной шириной спектрального состава монохроматизированного излучения и аналогичное уширение (I3) в горизонтальной плоскости, но с соответствующим значением угловой дисперсии D_0 на объекте. Как правило, при малоугловых исследованиях этим уширением так же можно пренебречь.

При вычислении потока дифрагированного излучения выражение (I6) распадается на независимые множители. Распределения $Q_x(x)$ и $A(\varepsilon)$ нормированы на единицу, а интегрирование выражения (I) по вертикальному углу φ

дает спектральную плотность $\mathcal{W}_e(\lambda)$ полного потока СИ моноэнергетического электрона /I9/

$$\mathcal{W}_e(\lambda) = \int I(\varphi, \lambda) d\varphi = \frac{3^{5/2}}{16\pi^2} \frac{e^2 c}{\rho^3} \gamma^7 G(t) \quad (I8)$$

где $G(t) = t^3 \int_0^\infty K_{5/3}(\varepsilon) d\varepsilon$. График зависимости $G(t)$ приводится там же. Аналогичное по структуре выражение получается и с учетом изменения энергии электрона за цикл ускорения в синхротроне /I9/. Поэтому, воспользовавшись приложением, для потока дифрагированного излучения можно записать

$$W_u = \mathcal{W}_e(\lambda_0) \frac{P}{ec} i \quad (I9)$$

Для проекции освещенности в максимуме дифрагированного пучка на вертикальную плоскость можно записать, как и в горизонтальной плоскости

$$E_{mu} = 0.4 \frac{W_u}{\sigma_{wu}} = 0.9 \frac{W_u}{\Omega_{wu}} \quad (20)$$

Энергетические параметры дифрагированного пучка СИ в плоскости регистрации. Для реального потока СИ с распределением спектральной плотности (2) и кристалла-монокроматора с передаточной функцией (3) энергетические распределения дифрагированного пучка в поперечном сечении w представляют собой свертку соответствующих распределений в горизонтальном и вертикальном направлениях. При этом для потока дифрагированного излучения можно записать:

$$W = W_v W_u = \frac{R}{D} \mathcal{W}_y(\lambda_0) \mathcal{W}_e(\lambda_0) \frac{P}{ec} i \quad (21)$$

и для освещенности в максимуме:

$$E_m = E_{mu} E_{mv} = 0.16 \frac{W}{\sigma_{wu} \sigma_{wv}} = 0.81 \frac{W}{\Omega_{wu} \Omega_{wv}}$$

Варианты схемы монохроматизации. Полученные в случае кристалла по Иоганну /28/ общие выражения для пространственно-энергетического преобразования параксиального полихроматического пучка рентгеновского излучения применимы к различным вариантам схемы монохроматизации СИ как с изогнутыми, так и с плоскими кристаллами-монокроматорами на прохождение и на отражение. При всех вариантах в каждом поперечном

сечении дифрагированного пучка получается астигматическое изображение сопряженного сечения первичного пучка. Кривизна и асимметрия кристалла не влияют на распределение освещенности в вертикальной плоскости, в горизонтальной плоскости они непосредственно определяют геометрическую часть ширины поперечного сечения дифрагированного пучка.

При монохроматизации излучения с широким спектральным составом сопряженные сечения, связанные условиями фокусировки (5), не лежат на окружности круга Роуанда при полихроматической фокусировке и находятся на ней лишь в частном случае монохроматической фокусировки в отличие от фокусирующих схем по Иоганну, Кошуа /18/ или Дю-Монду /22/, предназначенных для выделения узкой характеристической линии на фоне тормозного излучения рентгеновской трубки, где источник и/или точка фокусировки характеристического излучения обязательно располагаются на окружности круга Роуанда.

Критерием применимости полученных преобразований является малая по сравнению со спектральной шириной источника ширина распределения (12) спектральной плотности потока дифрагированного излучения, то есть с учетом (12) малое отношение угла зрения с поверхности кристалла сечения падающего пучка окружностью круга Роуанда и угловой дисперсии излучения.

В табл. I представлены варианты схемы монохроматизации СИ с различными типами кристаллов-монокроматоров, дано схематическое изображение этих вариантов, указан тип оптического преобразования согласно классификации /1/, приведены знаки фокусных расстояний f_1 и f_2 и коэффициента асимметрии b . Ниже дается краткое описание особенностей различных вариантов, а также рассматривается влияние вышлифовки поверхности кристалла по Иоганссону /23,29/ и изгиба по логарифмической спирали /20, 21/.

Плоский кристалл-монокроматор. В этом случае радиус кривизны и

фокусные расстояния кристалла бесконечно велики. Коэффициент увеличения $M = b^{-1}$. Плоскость виртуального источника связана с плоскостью регистрации соотношением $z = -bw$. В случае Брегга мнимый виртуальный источник располагается на продолжении первичного пучка за кристалл-монокроматором, а в случае Лауэ виртуальный источник находится по одну сторону с электронным пучком от кристалла-монокроматора и оказывается действительным для $0 < z < z_e$ и мнимым для больших z .

Изогнутый кристалл по Иоганну /24,28/. Из условий фокусировки (5) следует $M = -\frac{w}{z} = \frac{f_2 - w}{f_1} = \frac{f_2}{f_1 - z}$. При $w > f_2$, $M < 0$ виртуальный источник лежит за фокусным расстоянием f_1 в сторону электронного пучка. При $0 < w < f_2$, $M > 0$ мнимый виртуальный источник располагается на продолжении первичного пучка в отсутствие кристалла-монокроматора.

Выпуклый кристалл на отражение. При $w > 0$, $M > 0$ мнимый виртуальный источник лежит на участке $f_1 < z < 0$ продолжения первичного пучка в отсутствие монокроматора. Спектральный состав монохроматизированного излучения определяется распределением освещенности в поперечном сечении $z = 2f_1 < 0$ на том же продолжении первичного пучка.

Изогнутый кристалл по Кошуа /18/. Геометрическая часть распределения освещенности в плоскости регистрации такая же, как для монокристалла с коэффициентом асимметрии $b' = -b$ при фокусировке по Иоганну и такого же первичного пучка, распространяющегося в противоположном направлении. При $0 < w < f_2$, $M < 0$ виртуальный источник лежит по одну сторону с электронным пучком от кристалла-монокроматора и оказывается действительным для $0 < z < z_e$ и мнимым для больших z . При $w > f_2$, $M > 0$ мнимый виртуальный источник располагается за монокроматором на расстоянии $z < f_1 < 0$. Спектральный состав монохроматизированного излучения определяется подобно тому, как в случае выпуклого кристалла на отражение.

Изогнутый кристалл по Дю-Монду /22/. Распределение освещенности в плоскости регистрации совпадает с распределением для мнимого

изображения в случае кристалла с коэффициентом асимметрии $b' = -b$, изогнутого по Иоганну, и виртуального источника, отстоящего менее чем на фокусное расстояние f_1 от кристалла.

Кристалл с вышлифовкой поверхности по Иоганссону /23,29/ (рис.4).

В рассматриваемом приближении при выводе условий фокусировки пренебрегается кривизной поверхности кристалла; что допустимо, очевидно, когда отклонение a поверхности кристалла от плоскости касательной к ней в центре кристалла мало по сравнению с длиной $2b$ освещенной поверхности. При радиусе кривизны поверхности r_s пропорциональном радиусу кривизны отражающих плоскостей $r_s = kr$ из рис.4 легко найти $a/b = b/r_s = \chi_0/k \ll 1$, где χ_0 - малая угловая апертура кристалла, видимого из центра кривизны отражающих плоскостей. В частности для кристалла по Иоганссону, $k = 2$ дополнительная вышлифовка поверхности как при фокусировке на отражение /29/, так и на прохождение /23/ не оказывает влияния на распределение освещенности в плоскости регистрации.

Изгиб кристалла по логарифмической спирали /20,21/ (рис.5). Как известно, изогнутый по логарифмической спирали $\rho = \rho_0 \exp(\chi/tg \psi_h)$ кристалл собирает в точку излучение протяженного монохроматического источника. Радиус кривизны кристаллической решетки в точке χ составляет /9/ $r = \rho / \sin \psi_h \approx r_0 (1 + \chi/tg \psi_h)$, где r_0 - радиус кривизны в центре кристалла ($\chi = 0$). Выражения для преобразования пучка в горизонтальной плоскости получены в пренебрежении членами вида $\chi^2 r$, имеющими 2-ой порядок малости по χ . Поэтому изгиб кристалла по кривой, кривизна которой с точностью до χ постоянна в пределах малой угловой апертуры χ_0 , при монохроматизации СИ аналогичен кристаллу, фокусирующему по Иоганну. В частности, предложенный в работе /35/ кристалл-монохроматор СИ, изогнутый по логарифмической спирали, по-видимому, не улучшит качество схемы монохроматизации, так же как и предложенный в работе /36/ параболический монохроматор.

Выбор оптимальной
схемы монохроматизации

Оптимальная схема монохроматизации должна обеспечить наибольшую светосилу при заданных УРС в горизонтальной $\Gamma_{\epsilon v}$ и вертикальной $\Gamma_{\epsilon u}$ плоскостях.

$$\Gamma_{\epsilon v} = \frac{\epsilon_{dv}}{w_d - w_0} \quad (22)$$

$$\Gamma_{\epsilon u} = \frac{\epsilon_{du}}{w_d - w_0} \quad (23)$$

где w_0 и w_d - положение исследуемого объекта и плоскости регистрации соответственно, а $\epsilon_{dv} = \epsilon_{wv}|_{w=w_d}$ и $\epsilon_{du} = \epsilon_{wu}|_{w=w_d}$ - СКО сечения дифрагированного пучка в горизонтальном и вертикальном направлениях в плоскости регистрации w_d , определяемые формулами (14.1) и (17.1) соответственно. Аналогичные выражения получаются для полуширин. Поэтому дальнейшее рассмотрение проводится только для СКО соответствующих распределений и может быть перенесено на их полуширины заменой в полученных выражениях обозначения ϵ на Ω .

Обычно стремятся максимизировать поток дифрагированного излучения (21), что обеспечивает максимальную скорость счета при ионизационной регистрации или максимальную плотность почернения при фоторегистрации достаточно плавных дифракционных картин /25/. Для объекта с дискретным дифракционным спектром можно допустить УРС более низкую, чем ширина дифракционных пиков. В этом случае максимальной плотности почернения при фоторегистрации соответствует максимальная освещенность в первичном пучке /17/. В плоскости установки образца его размеры в горизонтальном $\epsilon_{ov}(\Omega_{ov})$ и вертикальном $\epsilon_{ou}(\Omega_{ou})$ направлениях ограничивают рабочее сечение монохроматизированного пучка, определяемое формулами (14) и (17) соответственно. Конструктивные особенности источников СИ, требования радиационной безопасности накладывают, как правило, дополнительные ограничения при выборе оптимальной схемы монохроматизации.

Оптимальная схема с каждым конкретным случае может быть найдена с помощью численных методов. При необходимости в вертикальной плоскости УРС может быть увеличена, а размер поперечного сечения дифрагированного пучка уменьшен с помощью фокусирующих кристалла или зеркала полного внешнего отражения. Дальнейшее рассмотрение относится лишь к горизонтальной плоскости. Как следует из выражения (21) в горизонтальной плоскости УРС схемы складывается из двух частей: геометрической - $\Gamma_{\text{сг}}$ и дифракционной - $\Gamma_{\text{сд}}$, связанной с рентгенооптическими свойствами кристалла-монокроматора,

$$\Gamma_{\text{св}}^2 = \Gamma_{\text{сг}}^2 + \Gamma_{\text{сд}}^2 \quad (24)$$

$$\Gamma_{\text{сг}} = \frac{\epsilon_{zy}/z}{1 - w_0/w_d} \quad (25)$$

$$\Gamma_{\text{сд}} = \frac{((1-b)^2 \epsilon_T^2 + 4\epsilon_A^2)^{1/2}}{1 - w_0/w_d} \quad (26)$$

Геометрическая часть УРС (25) не зависит от кривизны кристалла-монокроматора, если только исследуемый объект расположен достаточно близко к нему. Принципы выбора оптимальной геометрии и кристалла-монокроматора можно установить из анализа полученных выражений в простом и практически важном случае коллимационной системы, состоящей из единственной щелевой диафрагмы с пропусканием $\Phi_y(y, \alpha, \lambda) = \Phi_y(y)$, $\Phi_x(x, \varphi, \lambda) = 1$. С учетом приложения СКО ϵ_{zy} распределения спектральной плотности освещенности (10) в горизонтальном направлении поперечного сечения z первичного пучка (I) составляет

$$\epsilon_{zy}^2 = \left(\frac{z - z_\phi}{z_e - z_\phi}\right)^2 \epsilon_e^2 + \left(\frac{z_e - z}{z_e - z_\phi}\right)^2 \epsilon_\phi^2 \quad (27)$$

где ϵ_e и ϵ_ϕ - СКО распределения $Q_y(y)$ и функции пропускания $\Phi_y(y)$ коллимационной системы соответственно. Горизонтальная составляющая спектральной плотности потока (II) пропорциональна угловой апертуре первичного пучка

$$W_y(\lambda) = \frac{\langle \Phi \rangle}{|z_e - z_\phi|} \quad (28)$$

где $\langle \Phi \rangle = \int \Phi_y(y) dy$ - интегральное пропускание коллимационной системы в горизонтальном направлении. Для горизонтальной составляющей (8) потока дифрагированного излучения можно записать

$$W_v = \frac{\langle \Phi \rangle}{|z_e - z_\phi|} \frac{R}{D} \quad (29)$$

Оценку (29) можно преобразовать подобно тому, как предложено в работе /4/.

$$W_v = k_\epsilon^2 \frac{P_m \epsilon_p}{D} \frac{\Phi_m \epsilon_\phi}{|z_e - z_\phi|} = k_\Omega^2 \frac{P_m \Omega_p}{D} \frac{\Phi_m \Omega_\phi}{|z_e - z_\phi|} \quad (30)$$

где P_m и Φ_m - максимальные значения коэффициента отражения кристалла и функции пропускания коллимационной системы. ϵ_p и Ω_p - СКО и полуширина распределения коэффициента отражения $P(\epsilon)$. Из (4) следует $\epsilon_p^2 = \epsilon_T^2 + \epsilon_A^2$. С учетом (26) и (27) из оценки (30) легко видеть, что вклады в УРС схемы монохроматизации геометрической $\Gamma_{\text{сг}}$ и дифракционной $\Gamma_{\text{сд}}$ частей должны быть равны

$$\Gamma_{\text{сг}}^2 = \Gamma_{\text{сд}}^2 = \frac{\Gamma_{\text{св}}^2}{2} \quad (31)$$

иначе можно было бы увеличить поток дифрагированного излучения, не ухудшая существенно УРС схемы (24). Поскольку СКО ϵ_{dv} сечения дифрагированного потока в плоскости регистрации связано с угловым разрешением $\Gamma_{\text{св}}$ соотношением (22), наибольшее значение горизонтальной составляющей (15) освещенности в максимуме дифрагированного пучка также достигается при выполнении условия (31). Разделение (31) на геометрическую и дифракционную УРС позволяет отдельно рассмотреть выбор геометрии схемы монохроматизации и кристалла-монокроматора.

Выбор геометрии схемы. Фокусировка на электронную орбиту. Очевидно, светосильная схема монохроматизации получается в случае, если роль входного зрачка схемы играет изображение исследуемого образца, а размеры кристалла-монокроматора исключают виньетирование. Апертурная диафрагма устанавливается непосредственно перед образцом или в сопря-

женной ему плоскости $z_\phi = z_c = -w_c/M_0$ первичного пучка. В последнем случае СКО ϵ_ϕ ее функции пропускания Φ_y составляет $\epsilon_\phi = -\epsilon_0/M_0$

Максимальная угловая апертура схемы достигается в случае, когда в плоскости установки образца вклад дифракционного уширения в сечение пучка пренебрежимо мал, что практически всегда может быть реализовано соответствующим выбором расстояния образец - монохроматор $w_0 \ll \epsilon_0/\epsilon_c$

Для двух пар сопряженных плоскостей z_1, w_1 и z_2, w_2 из условий фокусировки (5) вытекает

$$\frac{w_1 - w_2}{z_2 - z_1} = bM_1M_2 \quad (32)$$

Воспользовавшись этим соотношением, выражение (25) с учетом (27) можно преобразовать к виду

$$\Gamma_{\epsilon g}^2 = \left(\frac{\epsilon_e M_e}{w_0 - w_e}\right)^2 + \left(\frac{w_d - w_e}{w_d - w_0}\right)^2 \left(\frac{\epsilon_0}{w_0 - w_e}\right)^2$$

где w_e - плоскость, сопряженная сечению z_e электронного пучка. Самое высокое разрешение достигается в плоскости регистрации $w_d = w_e$, сопряженной сечению z_e электронного пучка. Оно не зависит от размеров образца и составляет

$$\Gamma_{\epsilon g} = -\frac{\epsilon_e M_e}{w_d - w_0} = -\frac{\epsilon_e}{(z_0 - z_e)bM_0} \quad (33)$$

где $M_e = -\frac{w_d}{z_e} < 0$, поскольку $w_d > w_0 > 0$ и $z_e < 0$ при любом варианте схемы монохроматизации. Соответственно максимальная величина геометрического фактора $\frac{\epsilon_\phi}{|z_e - z_\phi|}$ в оценке (30) потока дифрагированного излучения при выполнении условия (31) составит

$$\frac{\epsilon_\phi}{|z_e - z_\phi|} = \frac{\Gamma_{\epsilon v}}{\sqrt{2}} \frac{\epsilon_0 b}{\epsilon_e} \quad (34)$$

и для наибольшей величины горизонтальной составляющей (15) освещенности в максимуме дифрагированного пучка можно записать

$$E_{mv} = \frac{\Phi_m}{k_e \sqrt{2}} \frac{\epsilon_0 b}{\epsilon_e (w_d - w_0)} \frac{R}{D} \quad (35)$$

при расположении источника в плоскости $z_e = \frac{\epsilon_e \sqrt{2}}{\Gamma_{\epsilon v} (1 - w_0/w_d)}$

Фокусировка на щелевую диафрагму. Конструктивные размеры ограничивают расстояние z_e от электронной орбиты до кристалла-монохроматора и возможность достижения оптимальной геометрии при высокой УРС схемы в рассмотренном случае фокусировки на электронную орбиту. В этой

ситуации можно использовать другую светосильную схему монохроматизации, которая получается при помещении образца в плоскость w_e изображения источника СИ $w_0 = w_e$ и выполнении условия $M_e = -\epsilon_0/\epsilon_e$. УРС схемы в этом случае определяется коллимационной системой. Из выражений (25), (27) с учетом (32) следует

$$\Gamma_{\epsilon g}^2 = \left(\frac{w_\phi - w_d}{w_d - w_e}\right)^2 \left(\frac{\epsilon_0}{w_\phi - w_e}\right)^2 + \left(\frac{\epsilon_\phi M_\phi}{w_\phi - w_e}\right)^2,$$

где w_ϕ - плоскость, сопряженная плоскости установки диафрагмы. Наиболее высокое, не зависящее от размера образца разрешение получается в плоскости регистрации $w_d = w_\phi$,

$$\Gamma_{\epsilon g} = -\frac{\epsilon_\phi M_\phi}{w_d - w_e} = -\frac{\epsilon_\phi}{(z_e - z_\phi)bM_e}, \quad (36)$$

где для любого варианта схемы монохроматизации $w_d > w_0 > 0$ и $z_e > z_\phi > 0$, что возможно лишь при $M_\phi < M_e < 0$. В оптимальном случае, когда СКО функции пропускания коллимационной системы и расстояние от нее до кристалла-монохроматора связаны соотношением $\frac{\epsilon_\phi}{z_\phi} = \frac{\Gamma_{\epsilon v}}{\sqrt{2}} (1 - w_0/w_d)$, геометрический фактор потока и горизонтальная составляющая освещенности в максимуме дифрагированного пучка также определяются выражениями (34) и (35) соответственно.

Схема монохроматизации с фокусировкой на плоскость коллимационной системы позволяет выбрать удобные расстояния z_e и z_ϕ путем подбора ϵ_ϕ , обеспечивающего выполнение условий (36). Так, например, эти расстояния могут быть уменьшены при соответствующем уменьшении ширины функции пропускания коллимационной системы без потери светосилы и УРС.

Обусловленные оптимальной геометрией области расположения основных элементов рентгенооптической схемы ограничивают ее возможные варианты. В табл. I для значений $w > 0$ приведены сопряженные области пространства источников при коэффициенте поперечного увеличения $M < 0$. Из табл. I и условия (32) следует, что оба светосильных расположения осуществимы лишь в схеме с вогнутым кристаллом на отражение. В схемах с дифракцией на прохождение возможна лишь фокусировка на электронную орбиту, а для плоского и выпуклого кристаллов в случае Брэгга оба варианта

невыполнимы. Возможность оптимальной фокусировки также отмечена в табл. I для всех представленных там вариантов.

Выбор кристалла-монокроматора. Из условия (31) следует, что для достижения необходимой УРС ее дифракционная часть (26) не должна превышать $\frac{\Gamma_{sv}}{\sqrt{2}}$. Следовательно, в зависимости от конкретных значений УРС и коэффициента асимметрии кристалла для достижения максимального значения σ_p в выражении (30) желательно использовать кристаллы, для которых можно пренебречь вкладом в σ_c одной из составляющих $|1-b|\sigma_T$ или $2\sigma_A$.

Как видно из (26), совершенные кристаллы ($\sigma_A=0$) в симметричном случае Брэгга ($b=1$) не вызывают уширения дифрагированного пучка. Однако в диапазоне длин волн рентгеноструктурного анализа их интегральное отражение не превышает $(6+8)10^{-5}$ рад. и ограничивает светосилу схемы. Интегральное отражение совершенного асимметричного кристалла увеличивается пропорционально $b^{-1/2}$ за счет увеличения ширины распределения коэффициента отражения /14/. В то же время согласно (30) угловая апертура схемы пропорциональна коэффициенту асимметрии b , и в целом дифрагированный поток растет как $b^{1/2}$. В зависимости от соотношения между шириной распределения коэффициента отражения симметричного кристалла σ_{T5} и разрешением схемы рост асимметрии ограничивается условием $|b^{1/2}-b^{-1/2}| = \frac{\Gamma_{sv}(1-w_c/w_d)}{\sigma_{T5}\sqrt{2}}$. Кроме того с ростом b возрастает поглощение излучения в кристалле /14/, и для больших значений b оказывается в соответствии с кинематическим приближением теории дифракции $R \sim b^{-1}$.

Для рентгенооптических схем, не требующих разрешения лучей I' в горизонтальной плоскости можно использовать мозаичные, например, шлифованные кристаллы-монокроматоры. Для них часто допустимо пренебречь первым слагаемым в выражении (26) и считать $\Gamma_{sc} = \frac{2\sigma_A}{1-w_c/w_d}$. Как известно,

интегральное отражение таких кристаллов растет пропорционально $(b+1)^{-1}$, в основном, за счет увеличения коэффициента отражения в максимуме /7/. С учетом зависимости от b выражения (34) максимальный поток дифрагированного излучения достигается при коэффициенте асимметрии b , составляющем несколько единиц, и дальнейшее увеличение асимметрии практически не меняет величину потока. В соответствии с выражениями (17), (23) совершенный кристалл-монокроматор не влияет на разрешение в вертикальной плоскости, а угловая разориентация ОКР ухудшает его.

Для выбранных наилучшим образом совершенных или мозаичных кристаллов-монокроматоров при условии (31) из (25), (26) следует, что СКО коэффициента отражения пропорционально углу зрения с поверхности кристалла сечения первичного пучка, сопряженного плоскости регистрации. Так, при фокусировке на плоскость электронной орбиты $\sigma_p = \frac{1}{\rho} \frac{\sigma_e}{z_e}$ и при фокусировке на коллимационную систему $\sigma_p = \frac{1}{\rho} \frac{\sigma_\phi}{z_\phi}$.

Итак, в случае оптимального выбора геометрии схемы и кристалла-монокроматора горизонтальная составляющая потока дифрагированного излучения в соответствии с оценкой (30) и с учетом выражений (26), (34) принимает значение

$$W_V = k_G^2 \frac{P_m \Phi_m}{\rho D} \frac{\sigma_c b}{\sigma_e} \frac{\Gamma_{sv}^2}{2}$$

Таким образом, поток излучения спадает с повышением УРС схемы пропорционально квадрату последней за счет ограничения апертуры схемы и спектрального пропускания используемого отражения кристалла монокроматора.

Горизонтальная составляющая освещенности в максимуме согласно (26) и (35) в оптимальном случае принимает значения

$$E_{mv} = k_G \frac{P_m \Phi_m}{\rho D} \frac{\sigma_c b}{\sigma_e} \frac{\Gamma_{sv}}{2} \frac{1}{w_d}$$

Освещенность в максимуме оказывается прямопропорциональна УРС схемы, ограничивающей спектральное пропускание кристалла-монокроматора. Для ее повышения необходимо приближать плоскость регистрации w_d к моно-

хроматору, что уменьшает размытие сфокусированного изображения передаточной функцией кристалла.

Расчетные формулы для определения параметров схемы монохроматизации.

В табл.2 для обоих оптимальных случаев фокусировки приведен ряд расчетных формул по определению параметров схемы монохроматизации при заданных УРС Γ_{σ_V} размерах образца σ_0 и сечения электронной орбиты σ_e , а в случае совершенного кристалла-монокроматора при дополнительно заданном СКО σ_{TS} распределения коэффициента отражения в симметричном случае. При фокусировке на электронную орбиту также предполагаются заранее выбранными размер малоугловой камеры $N = w_d - w_0$ и расстояние w_d от монокроматора до плоскости регистрации. При фокусировке на целевую диафрагму считаются заданными размер малоугловой камеры N и расстояние от электронной орбиты до плоскости установки диафрагмы $L = z_e - z_\phi$.

Пример расчета. При малоугловом исследовании сокращающейся мышцы наблюдается перераспределение интенсивности между рефлексами, отвечающими межплоскостным расстояниям 143 \AA и $144,6 \text{ \AA}$ /27/. При разрешающей способности по межплоскостному расстоянию $1,6 \text{ \AA}$ и длине волны монохроматизированного излучения $1,48 \text{ \AA}$ УРС составляет $\Gamma_\Omega = 16''$. Выбирая для монохроматизации отражение (III) совершенного германия с полушириной распределения коэффициента отражения в симметричном случае $\Omega_{TS} = 16''$ и задавая размер образца $\Omega_0 = 2 \text{ мм}$, с помощью формул табл.2 можно рассчитать оптимальную схему для проведения измерений на накопительном кольце ВЭП-3, для которого согласно /8/ $\sigma_e = 0,75 \text{ мм}$ и принято

$\Omega_e = 2,34 \sigma_e = 1,75 \text{ мм}$ как при нормальном распределении. Расчетные параметры схемы представлены в табл.3. Для удобства при сравнении в случае фокусировки на щель выбрано то же значение коэффициента асимметрии кристалла $= 2$, что и при фокусировке на орбиту

На выбор схемы монохроматизации влияют также ее шумовые характеристики, связанные как с рассеянием на кристалле-монокроматоре, так и с

геометрией схемы. Во-первых, ввиду широкого спектрального диапазона СИ наблюдается заметный вклад гармоник монохроматизированного рентгеновского излучения в дифрагированный поток. Воспользовавшись выражениями (18), (21), для отношения потоков дифракционного излучения на n -ой гармонике и основной длине волны можно записать

$$\frac{W(\lambda/n)}{W(\lambda)} = \frac{G(nt)}{G(t)} \frac{\Xi_n}{n} \quad (37)$$

где Ξ_n - коэффициент подавляемости n -ого порядка. Влияние излучения кратных длин волн может быть ослаблено путем разумного выбора соотношения $t = \lambda_c / \lambda$ между монохроматизируемой и критической длинами волн и при использовании кристаллов с малыми коэффициентами подавляемости.

Во-вторых, важный параметр рентгенооптических схем для малоугловых исследований - минимальный регистрируемый угол ограничен диффузным недифракционным рассеянием непрерывного спектра СИ на поверхности кристалла. Это рассеяние ограничивает также возможность приближения объекта и плоскости регистрации к кристаллу-монокроматору с целью повышения освещенности в максимуме.

Рентгенооптические схемы на прохождение могут обеспечить значительное снижение недифракционного фона только при достаточно большой толщине кристалла, обеспечивающей заметное поглощение всего спектрального состава падающего пучка. Тем не менее благодаря аномальной дифракции /14/ на толстом совершенном кристалле-монокроматоре может оказаться, что несмотря на значительную потерю светосилы критерий чувствительности схемы на прохождение выше чем у схемы с аналогичной геометрией и кристаллом-монокроматором на отражение. Поскольку при исследованиях на СИ с ионизационной регистрацией ограничивающим фактором является предельная скорость счета детектора /31/, применение кристаллов-монокроматоров на прохождение при более интенсивных режимах работы источников СИ в определенных условиях может заметно уменьшить время съемки.

Экспериментальные результаты

Для проверки выражений, описывающих пространственно-энергетическое преобразование пучка СИ в кристаллы-дифракционной рентгенооптической схеме монохроматизации на накопительном кольце БЭП-3 ИЯФ СОАН СССР были проведены измерения соответствующих параметров дифрагированного пучка. Параметры накопителя, определяющие пространственно-энергетические характеристики пучка СИ, приведены в работе /8/. Формирование первичного пучка осуществлялось с помощью щелевой коллимационной системы, которая устанавливалась в различных сечениях канала вывода СИ. Измерения проводились с плоскими и упруго изогнутыми симметричными и асимметричными, шлифованными и полированными кристаллами кварца, кремния и германия, а также с пиролитическим графитом. Монохроматор настраивался на выделение узкого спектрального участка излучения вблизи длины волны $\lambda_0 = 1.48 \text{ \AA}$. Для регистрации дифрагированного излучения использовался сцинтилляционный детектор в режиме токовой регистрации, предварительно откалиброванный с помощью эталонного монохроматического источника для пересчета в абсолютный поток излучения в имп/сек.

Распределение проекции освещенности на горизонтальную и вертикальную плоскости измерялось пошаговым сканированием в плоскости регистрации щелевой диафрагмы, охватывающей весь дифрагированный пучок в вертикальном и горизонтальном направлениях соответственно. Количество шагов выбиралось порядка 20. На каждом шаге измерялся также электронный ток накопителя. По распределению значений потока, приведенных к электронному току в 1 ма, определялись полуширина и СКО распределения освещенности в соответствующих направлениях в плоскости регистрации. Для определения проекции освещенности в максимуме максимальный зарегистрированный и приведенный к единичному току накопителя поток

относился к ширине сканирующей диафрагмы. При измерении потока дифрагированного излучения диафрагмирование в плоскости регистрации отсутствовало.

Размеры кристаллов монохроматоров составляют $50 \times 25 \times 1 \text{ мм}^3$. Значительная толщина кристаллов исключает возможность их деформации за счет внутренних напряжений, что особенно важно при больших радиусах кривизны. Расчет по данным для предельных напряжений упругой деформации кремния и германия, приведенным в работах /6/ и /10/ соответственно, дает значения предельной относительной упругой деформации порядка $(0.15 \pm 0.25)\%$, что позволяет изгибать кристаллы-монохроматоры на радиус кривизны до 1 м.

Контроль изгиба кристаллов осуществлялся с помощью лазерного луча, падающего на их поверхность под малым скользящим углом ϵ . Для шлифованных поверхностей это позволило получить зеркальное отражение удовлетворительного качества без потери точности измерений. С целью уменьшения влияния расходимости лазерного пучка, составлявшей $\sim 3'$ расстояние, проходимое им до падения на кристалл, увеличивалось до $l_1 = 50 \text{ м}$ с помощью последовательных отражений от двух параллельных плоских зеркал. Радиус изгиба кристалла r определялся по формуле вогнутого зеркала

$$\frac{1}{l_1} + \frac{1}{l_2} = \frac{1}{f}$$

где $f = \frac{1}{2} r \sin \epsilon$ и l_2 - расстояние до точки фокусировки отраженного пучка. Точность измерения радиуса изгиба составляла $\sim 6\%$ и ограничивалась погрешностью в определении точки фокусировки, вызванной дифракцией света на краях кристалла.

Рентгенооптические свойства монохроматоров (см. табл.4) определены для плоских кристаллов, и предполагаются неизменными при больших радиусах кривизны, на которых производились измерения. Интегральное отражение R_e , СКО σ_p и полуширина Ω_p определены на трехкристальном спектрометре, собранном на базе дифрактометра ДРОН-2,0. Два первых

полированных асимметричных кристалла кварца (ЮИИ) с коэффициентом асимметрии $b_1 \approx b_2 = 0.07$ составляли монохроматор, обеспечивающий расходимость дифрагированного пучка не хуже $0.5''$. Спектрометр был настроен на длину волны $K\alpha_1$ компонента $K\alpha$ дублета излучения меди, что позволило пренебречь уширением экспериментальных кривых качания за счет ненулевой дисперсии спектрометра для отражений (III) кристаллов кремния и германия. Сравнение со значениями интегрального отражения в динамическом R_d и кинематическом R_k приближениях, также приведенными в табл.4 и вычисленными, как указано в работе /2/, позволяет считать, что полированные кремний и кварц являются высокосоввершенными кристаллами, и для них можно положить $\sigma_A = 0, \sigma_T = \sigma_P$, а для пирографита и шлифованного германия наоборот можно пренебречь вкладом в передаточную функцию кристалла передаточной функции отдельных ОКР по сравнению с их угловой разориентацией, то есть считать $\sigma_T = 0, \sigma_A = \sigma_P$.

В табл.4 приведены также коэффициенты подавляемости 2-го и 3-го порядка указанных отражений. Коэффициент подавляемости 2-го порядка отражения для кварца взят из работы /2/, а для графита определен по данным работы /3/. Для 3-го порядка отражения приведены значения коэффициента подавляемости в динамическом (числитель) и кинематическом (знаменатель) приближениях, вычисленные по формулам, приведенным в работе /2/, с учетом асимметрии кристаллов.

СКО и полуширина проекции распределения освещенности на горизонтальную плоскость согласно (I4) и с учетом (27) складывается из четырех компонентов, имеющих различную физическую природу

$$\sigma_{WV}^2 = M^2 \left(\frac{z_d - z_\phi}{z_e - z_\phi} \right)^2 \sigma_e^2 + M^2 \left(\frac{z_e - z_d}{z_e - z_\phi} \right)^2 \sigma_\phi^2 + (1-b)^2 \sigma_T^2 + 4\sigma_A^2 \quad (38.1)$$

$$\Omega_{WV}^2 = M^2 \left(\frac{z_d - z_\phi}{z_e - z_\phi} \right)^2 \Omega_e^2 + M^2 \left(\frac{z_e - z_d}{z_e - z_\phi} \right)^2 \Omega_\phi^2 + (1-b)^2 \Omega_T^2 + 4\Omega_A^2 \quad (38.2)$$

Для проверки влияния каждого из четырех слагаемых на суммарную ширину проекции распределения освещенности на горизонтальную плоскость путем

подбора соответствующей геометрии схемы и кристалла-монохроматора исследованы четыре асимптотических случая, когда вкладом всех кроме одного слагаемого можно пренебречь: случай А - фокусировка на цель, Б - фокусировка на электронную орбиту, В - асимметричный совершенный кристалл-монохроматор, Г - мозаичный кристалл-монохроматор. Случай А соответствует монохроматическая, а остальным случаям полихроматическая фокусировка. С целью проверки выражения (I7) для распределения освещенности в вертикальной плоскости также рассмотрены два асимптотических случая: Д - совершенный кристалл-монохроматор и Е - мозаичный кристалл-монохроматор. В горизонтальной плоскости были также проведены измерения в двух экстремальных случаях: Ж - на плоском кристалле, то есть при $r = \infty$ и З - при полихроматической фокусировке на бесконечность, то есть $M \approx 0$. В табл.5 указаны данные по геометрии рентгено-оптической схемы и использованным кристаллам для всех перечисленных случаев.

В табл.6 приведены вычисленные из измерений и расчетные значения потока дифрагированного излучения, проекции освещенности в максимуме, СКО и полуширины распределений освещенности в соответствующих плоскостях.

Для сравнения с измеренным потоком дифрагированного излучения оценку (2I) удобно представить в виде потока фотонов N_d в дифрагированном пучке в имп/сек. Для этого необходимо пересчитать вертикальную составляющую (I8) спектральной плотности потока Φ в число фотонов $N(\lambda)$ с энергией $\frac{hc}{\lambda}$ в спектральном интервале $I \text{ \AA}$, распространяющихся в угол I мрад в горизонтальной плоскости под всеми возможными вертикальными углами при синхротронном токе в I ма. Согласно /I6/

$$N(\lambda) = 2.46 \cdot 10^{13} t^{-2} G(t) E_e \lambda^{-4} i \quad \frac{\text{Фотон}}{\text{\AA сек ма мрад}},$$

где подставляется E_e - в Гэв, λ - в \AA , i - в ма. Согласно (28) и

с учетом поглощения излучения на невакуумированных участках схемы монохроматизации общей длиной ℓ можно записать (21) в виде удобном для расчетов

$$N_d = N(\lambda_0) e^{-\mu_{\lambda_0} \ell} \frac{\langle \Phi \rangle}{|z_e - z_{\phi}|} \frac{R}{D}$$

где $\mu_{\lambda_0} = 1.1 \cdot 10^{-2} \text{ см}^{-1}$ - линейный коэффициент ослабления в воздухе излучения с длиной волны $\lambda_0 = 1.48 \text{ \AA}$ из узкого спектрального интервала, дифрагирующего на кристалле-монокроматоре. При расчетах массовый коэффициент ослабления в воздухе был определен интерполяцией по данным справочника /12/.

$N(\lambda_0)$ рассчитывалось для значения электронного тока $i = 1 \text{ ма}$, к которому приводились экспериментальные данные. Все измерения проведены при энергии электронов $E_e = 2 \text{ ГэВ}$. Соответственно с учетом радиуса кривизны электронного пучка в месте отбора излучения $\rho = 6.15 \text{ м}$ /8/ параметр $t = 2.9$.

СКО распределений $Q_x(x)$ и $Q_y(y)$ приняты согласно данным работы /8/ $\sigma_x = 0.08 \text{ мм}$ и $\sigma_y = 0.75 \text{ мм}$ соответственно. Ввиду сложного вида распределений Q_x и Q_y /15/ для оценки их полуширины несколько произвольно выбрано $\Omega = 2.346$ как для нормального распределения. СКО и полуширины распределения $I(\varphi, \lambda)$ заметно различаются для различных спектральных компонентов СИ. Для синхротрона DESY в работе /5/ приведены рассчитанные на ЭЦВМ графики $I(\varphi, \lambda)$ при нескольких значениях параметра λ . Соответствующим изменением масштаба, как предложено в /5/, они были приведены к универсальному виду $I(\tau, t)$, и по кривой $t = 2.5$ высчитаны СКО и полуширина для спектрально-углового распределения $I(\varphi, \lambda)$ накопителя ВЭП-3 и длины волны СИ $\lambda_0 = 1.48 \text{ \AA}$.

На основании расчетных значений СКО и полуширин распределений освещенности дифрагированного пучка в плоскости регистрации по формулам (15) и (20) была оценена проекция освещенности в максимуме в горизонтальном и вертикальном направлениях соответственно.

Для всех приведенных в табл.6 расчетных величин указаны их относительные отклонения от экспериментальных значений. В таблице указаны

также отношение СКО и полуширины проверяемого слагаемого в выражении (38) к СКО и полуширине дифрагированного пучка, рассчитанным с учетом вклада других малых слагаемых.

С практической точки зрения расчетные оценки и экспериментальные значения параметров дифрагированного пучка находятся в хорошем согласии. Погрешность в определении потока дифрагированного излучения определяется, по-видимому, следующими факторами. Во-первых, предельный допустимый ток ФЭУ сцинтилляционного детектора ограничивал режим работы накопителя. Точность измерения малых токов накопителя, не превышавших в отдельных случаях 0.01 ма , сравнительно невысока. Во-вторых, настройка монохроматора на длину волны $\lambda_0 = 1.48 \text{ \AA}$ осуществлялась приближенно по скачку интенсивности дифрагированного излучения при прохождении К-края поглощения никелевого фильтра, что ввиду сильной зависимости ослабления дифрагированного излучения в воздухе от длины волны также ограничивает точность оценки потока. Вклад кратных длин волн в поток дифрагированного излучения, оцененный по формуле (37) и данным табл.4, пренебрежимо мал и при расчетах не учитывался.

Погрешность в оценке СКО, полуширины и освещенности в максимуме лежит в пределах, указанных в работе /4/. Расчетные значения СКО и полуширины в основном несколько ниже чем измеренные, что может быть объяснено пренебрежением вкладом в передаточную функцию кристалла передаточной функции отдельных ОКР в шлифованных кристаллах и наличием субструктуры в полированных кристаллах, в особенности изогнутых. Вместе с тем согласие экспериментальных и расчетных значений показывает, что использование для полированных кристаллов кремния и кварца передаточной функции идеального кристалла, рассчитанной с помощью динамической теории, и для пиролитического графита и шлифованного

германия передаточной функции, рассчитанной по одному лишь угловому распределению ОКР, в основном верно отображает пространственно-угловое преобразование пучка СИ на реальном кристалле и позволяет с достаточной для практических целей точностью рассчитать параметры рентгено-оптической схемы.

Обращает внимание, что точность в оценке полуширины распределения освещенности дифрагированного пучка выше чем в оценке его СКО в отличие от выводов работы /4/. Это связано, по-видимому, с устойчивостью полуширины к влиянию шумовых характеристик схемы, поднимающих крылья кривой распределения освещенности и приводящих к росту экспериментальных значений СКО.

Выводы

1. Для протяженного полихроматического рентгеновского источника получены выражения, описывающие пространственно-энергетическое преобразование излучения в кристалл-дифракционных рентгенооптических схемах. Введенные формулы для оценки потока, среднеквадратического отклонения, полуширины и максимальной освещенности в пучке дифрагированного излучения учитывают геометрию схемы и рентгенооптические свойства кристалл-дифракционного диспергирующего элемента.

2. В параксиальном приближении в каждом поперечном сечении дифрагированного пучка наблюдается астигматическое изображение сопряженного сечения первичного пучка. Сопряженные сечения связаны определенными условиями фокусировки. В плоскости дифракции изображение также "размывается" передаточной функцией реального кристалла.

3. Обсуждаются особенности использования плоских и изогнутых кристаллов-монокроматоров на отражение и на прохождение в различных фокусирующих схемах, и устанавливается область применимости полученных выражений.

4. Полученные выражения для преобразования пучка СИ позволяют

рассчитать оптимальные рентгенооптические схемы монохроматизации для малоугловых исследований, обеспечивающие максимальную светосилу при заданных в горизонтальной плоскости угловой разрешающей способности и размере исследуемого образца. В таких схемах плоскость регистрации может не лежать на окружности круга Роуленда.

5. При использовании кристаллов на отражение предлагаются два варианта оптимальной схемы монохроматизации с фокусировкой на электронную орбиту или на щелевую диафрагму. В последнем случае размеры схемы могут быть выбраны в широком интервале значений при соответствующем согласовании с шириной щелевой диафрагмы. Кристаллы на прохождение могут быть использованы только при фокусировке на электронную орбиту.

6. Для схемы с высокой угловой разрешающей способностью предпочтительно использовать совершенный, а для схемы с малым разрешением - мозаичный асимметричный кристалл-монокроматор. Оптимальная ширина дифракционного профиля кристалла-монокроматора определяется углом зрения с его поверхности сечения первичного пучка, сопряженного плоскости регистрации.

7. Для оптимальной схемы монохроматизации поток дифрагированного излучения пропорционален квадрату величины угловой разрешающей способности схемы. Освещенность в максимуме прямо пропорциональна расстоянию от кристалла-монокроматора до плоскости регистрации.

8. Экспериментальная проверка при различных геометрии схемы и кристаллах-монокроматорах показывает хорошее согласие расчетных оценок и измеренных параметров дифрагированного пучка СИ, что позволяет применять полученные формулы в практических расчетах.

9. Для ряда реальных кристаллов предложенная передаточная функция достаточно хорошо описывает пространственно-угловое преобразование излучения при дифракции даже в случае пренебрежения одним из факторов: угловой разориентацией ОКР для совершенных полированных кристаллов и

передаточной функцией отдельной ОКР для мозаичных, в частности, шлифованных кристаллов.

10. Полученные выражения могут быть применены для оценки параметров рентгенооптических схем, работающих не только на СИ, но и с другими источниками с достаточно плавным и широким спектральным составом излучения, например, при топографии в тормозном излучении рентгеновской трубки.

Авторы выражают благодарность сотрудникам ИЯФ СОАН СССР за предоставленную возможность проведения экспериментов и помощь в их подготовке.

Приложение

Преобразование и оценка параметров распределений

вида $F(x_n) = \int \prod_{j=1}^n f_j(a_j^i x_i + b_j) \prod_{k=1}^{n-1} dx_k$, где $i \leq n$.

Используя правила суммирования, указанные в /9/, введем переменные $\{y_j\}$ с помощью соотношений

$(a_j^i x_i + b_j) c_j = y_j - y_{j-1}$ (П1)

и дополнительно потребуем

$y_0 \equiv 0$

$y_n \equiv x_n + c^j b_j$

Полагаем, что поднятие индекса не меняет величину c_j : $c^j = c_j$. Суммируя

(П1), получаем $c^j a_j^i x_i + c^j b_j = y_n$

и с учетом (П2) $(c^j a_j^i - \delta_n^i) x_i \equiv 0$,

что возможно лишь при выполнении системы

$c^j a_j^i = \delta_n^i$

Отсюда легко найти $c_j = \frac{D_j}{D}$, где $D \equiv \det(a_j^i)$, а для D_j получается

$D_j = A_{i,j}^j \delta_n^i = A_{i,n}^j$,

то есть $c_j = \frac{A_{i,n}^j}{D}$, (П3)

где $A_{i,n}^j$ - алгебраические дополнения соответствующих элементов определителя D .

Вычислим теперь якобиан преобразования

$\frac{\mathcal{D}(x_i)}{\mathcal{D}(y_j)} = \frac{\mathcal{D}(y_i)^{-1}}{\mathcal{D}(x_j)} = \det^{-1} \left(\frac{\partial y_i}{\partial x_j} \right) \quad i, j \leq n-1$ (П4)

Определим символом d_k^j соотношение

$d_k^j = \begin{cases} 1 & j \leq k \\ 0 & j > k \end{cases} \quad k \leq n-1$

и дополнительно потребуем $d_k^j = 0$

Тогда домножая (П1) на d_k^j и проводя суммирование, получим

$d_k^j (a_j^i x_i + b_j) c_j = y_k$

Отсюда

$\frac{\partial y_k}{\partial x^i} = d_k^j a_j^i c^j$

Пользуясь свойствами определителей получаем цепочку преобразований /9/

$\det(d_k^j a_j^i c^j) = \det(d_k^j a_j^i x_i - d_{k-1}^j a_j^i c_j) = \det(c_k \alpha_k^j) = \prod_{k=1}^{n-1} c_k \det(\alpha_k^i)$

Теперь с учетом (П3) для якобиана (П4) можно записать

$\frac{\mathcal{D}(x_i)}{\mathcal{D}(y_j)} = \left(\prod_{j=1}^{n-1} \frac{A_{j,n}^j}{D} A_{j,n}^n \right)^{-1} = \mathcal{D}^{-1} / \prod_{j=1}^{n-1} A_{j,n}^j$

Следовательно, интеграл $F(x_n)$ преобразуется к интегралу типа многократной свертки с соответствующим масштабированием

$F(x_n) = \frac{\mathcal{D}^{n-1}}{\prod_{j=1}^n A_{j,n}^j} \int f_n \left(\frac{\mathcal{D}}{A_n^n} x_n + \frac{A_n^j b_j}{\mathcal{D}} - y_{n-1} \right) \prod_{k=1}^{n-1} f_k \left(\frac{\mathcal{D}}{A_k^n} (y_k - y_{k-1}) \right) dy_k$ (не суммировать по n и k) (П6)

Вводя переменные $z_j = \mathcal{D} y_j$ и $u_j = c_j^{-1} y_j$ получаем наряду с (П6) полезные представления

$F(x_n) = \frac{1}{\prod_{j=1}^n A_{j,n}^j} \int \prod_{j=1}^n f_j \left(\frac{z_j - z_{j-1}}{A_{j,n}^j} \right) \prod_{k=1}^{n-1} dz_k = \frac{1}{A_{n,n}^n} \int \prod_{k=1}^n f_k \left(u_k - \frac{A_{k-1}^{k-1} u_{k-1}}{A_{k,n}^k} \right) \prod_{j=1}^{n-1} du_j$ (не суммировать по k)

Как известно, дисперсия свертки есть сумма дисперсий свертываемых функций. Так же хорошо известно, что при изменении масштаба по оси абсцисс в m раз: $y = mx$ дисперсия σ_y^2 распределения $f(y)$ уменьшается в m^2 раз по сравнению с дисперсией σ_x^2 . Поэтому из (П6) следует

$\sigma_F^2 = \mathcal{D}^{-2} (A_{n,n}^j \sigma_j^2)$ (П7)

Для нулевого момента $\langle F \rangle$ распределения $F(x_n)$ имеем

$\langle F \rangle = \int F(x_n) dx_n = \mathcal{D}^{-1} \prod_{j=1}^n \langle f_j \rangle$,

где $\langle f_j \rangle = \int f_j(x) dx$.

Согласно работе /4/ для оценки полуширины и значения в максимуме можно записать

$\Omega_F^2 = \mathcal{D}^{-2} (A_{n,n}^j \Omega_j^2)$

и

$F_m = \frac{\prod_{j=1}^n \langle f_j \rangle}{k_\Omega (A_{n,n}^j \sigma_j^2)^{1/2}} = \frac{\prod_{j=1}^n \langle f_j \rangle}{k_\Omega (A_{n,n}^j \Omega_j^2)^{1/2}}$

соответственно, где Ω_j - полуширина распределения $f_j(x)$. $k_\sigma \approx 2.5$, $k_\Omega \approx 1.1$.

elkon

Список литературы

1. Борн М., Вольф Э. Основы оптики. М., "Наука", 1970, 856 с.
2. Владимирский Ю.Б., Коган М.Т. Плоский кварцевый кристалл-анализатор "Аппаратура и методы рентгеновского анализа". 1974, вып.13, с.74-86
3. Владимирский Ю.Б., Коган М.Т. Пиролитический графит как рентгеновский анализатор и монохроматор. "Аппаратура и методы рентгеновского анализа", 1975, вып.17, с.3-8
4. Владимирский Ю.Б., Коган М.Т. Оценка эффективности рентгеновских кристаллов-анализаторов и монохроматоров. "Аппаратура и методы рентгеновского анализа", 1975, вып.17, с.9-21
5. Годвин Р. Синхротрон как источник света. "Синхротронное излучение в исследовании твердых тел", сб.статей, М., "Мир", 1970, 292 с.
6. Городецкий А.Ф., Кравченко А.Ф. Основы физики полупроводников и полупроводниковых приборов. Новосибирск, "Наука", 1966, 352 с.
7. Джеймс Р. Оптические принципы дифракции рентгеновских лучей. М., ИЛ, 1950, 572 с.
8. Использование синхротронного излучения накопителем ВЭШ-3 для рентгеноструктурных исследований. "ДАН", 1974, 218, № 4, с.824-827. Авт. Мокульская Т.Д., Мокульский М.А., Никитин А.А. (и др.)
9. Корн Г., Корн Т. Справочник по математике. М., "Наука", 1973, 832 с.
10. Красик Б.А., Грибов Б.И. Полупроводники германий и кремний. М., "Металлургия", 1961, 270 с.
11. Куликов О.Ф. Экспериментальное исследование излучения и рассеяния света релятивистскими электронами. "Труды ФИАН", т.80, с.3-99
12. Миркин Л.И. Справочник по рентгеноструктурному анализу поликристаллов, М., Физматгиз, 1961, 863 с.
13. Опыт использования синхротронного излучения для рентгенографического исследования полимером. "Биофизика", 1975, 20, вып.5, с.801-806. Авт.: Вазина А.А., Герасимов В.С. /и др./.
14. Пинскер З.Г. Динамическое рассеяние рентгеновских лучей в идеальных кристаллах. М., "Наука", 1974, 368 с.
15. Синхротронное излучение. Сб.статей, ред.Соколов А.А. и Тернов И.М. И., "Наука", 1966, 228 с.
16. Синхротронное и ондуляторное излучение ускорителя ФИАН "Пахра". "Труды ФИАН", 1975, т.80, с.125-139. Авт.: Алферов Д.Ф., Беловинцев К.А., Келдыш Л.В. /и др./.
17. Bolduan O.E.A., Bear R.S. Effective use of collimating apertures in small angle X-ray diffraction cameras. "J.Appl. Phys.", 1949, 20, 983-992.
18. Cauchois Y. Extension de la spectrographie des rayons X. Spectrographie a focalisation par cristal courbe spectres d'emission X des gaz. "Ann. de Phys.", 1934, 1, 215-248.
19. Godling K. application of synchrotron. "Reps.progr.phys.", 1973, 36, 541-623.
20. De Broglie et Lindemann. Sur un nouveau procédé permettant d'obtenir très rapidement les spectres des rayons de Röntgen. "C.R.Ac.Sci.Paris", 1914, 158, 944.
21. De Wolff P.M. Selected topics on X-ray crystallography. Amsterdam, "North-Holland Publ.", 1951.
22. Du Mond J.W.M. A high resolving power curved crystal focusing spectrometer for short wave-length X-rays and gamma-rays. "Rev.Sci.Instr.", 1974, 18, 626-638.
23. Guinier A. La diffraction des rayons X aux très petits angles application a l'etude de phenomenes ultramicroscopiques. "Ann. de Phys.", 1939, 12, 161-237.
24. Guinier A. Sur les monochromateurs a cristal courbe. "C.R. Ac.Sci.Paris", 1946, 223, 31-32.
25. Guinier A., Fournet G. small angle scattering of X-rays. N.Y., "J.Willey", 1955, 268 p.
26. Holmes K.C. synchrotron radiation and its applications in biology. "Endeavour", 1974, 33, 60-66.
27. Huxley H.E., Brown W. The low angle X-ray diagram of ver-

- tebrate striated muscle and its behavior during contraction and rigor. "J.Mol.Biol.", 1967, 30, 383-434.
28. Johann H.H. Die Erzeugung lichtstarker Röntgenspektren mit Hilfe von Konkavkristallen. "Z.Phys.", 1931, 69, 185-206.
29. Johansson T. Über ein neuartiges genau fokussierendes Röntgenspektrometer, "Z.Phys.", 1933, 82, 507-528.
30. Kratky O., Pilz I. Recent advances and applications of diffuse X-ray small angle scattering on biopolymers in dilute solutions. "Quart.Revs.Biophys.", 1972, 5, 481-537.
31. Barrington Leich J., Rosenbaum G. An report on the application of synchrotron radiation to low angle scattering. "J. Appl.Cryst.", 1974, 7, 117-121.
32. Parratt L.G. Use of synchrotron orbit radiation in X-ray physics. "Rev.Sci.Instr.", 1959, 30, 297-299.
33. Rosenbaum G., Holmes K.C., Witz J. Synchrotron radiation as a source for X-ray diffraction. "Nature", 1971, 230, 434-437.
34. Smith L.P. The determination of X-ray line shapes by a double crystal spectrometer. "Phys.Rev.", 1934, 46, 343-351.
35. Webb N.G. Logarithmic - spiral focusing monochromator. "Rev. Sci.Instr.", 1976, 47, 545-547.
36. Wilson A.G.C. On the possibility of a parabolic parallelizing monochromator. "J.Appl.Cryst.", 1970, 3, 407.
37. Witz J. Focusing monochromators. "Acta Cryst.", 1969, A25, 30-42.
38. Zachariassen W.H. A general theory of X-ray diffraction in crystals. "Acta Cryst.", 1967, 23, 558-564.

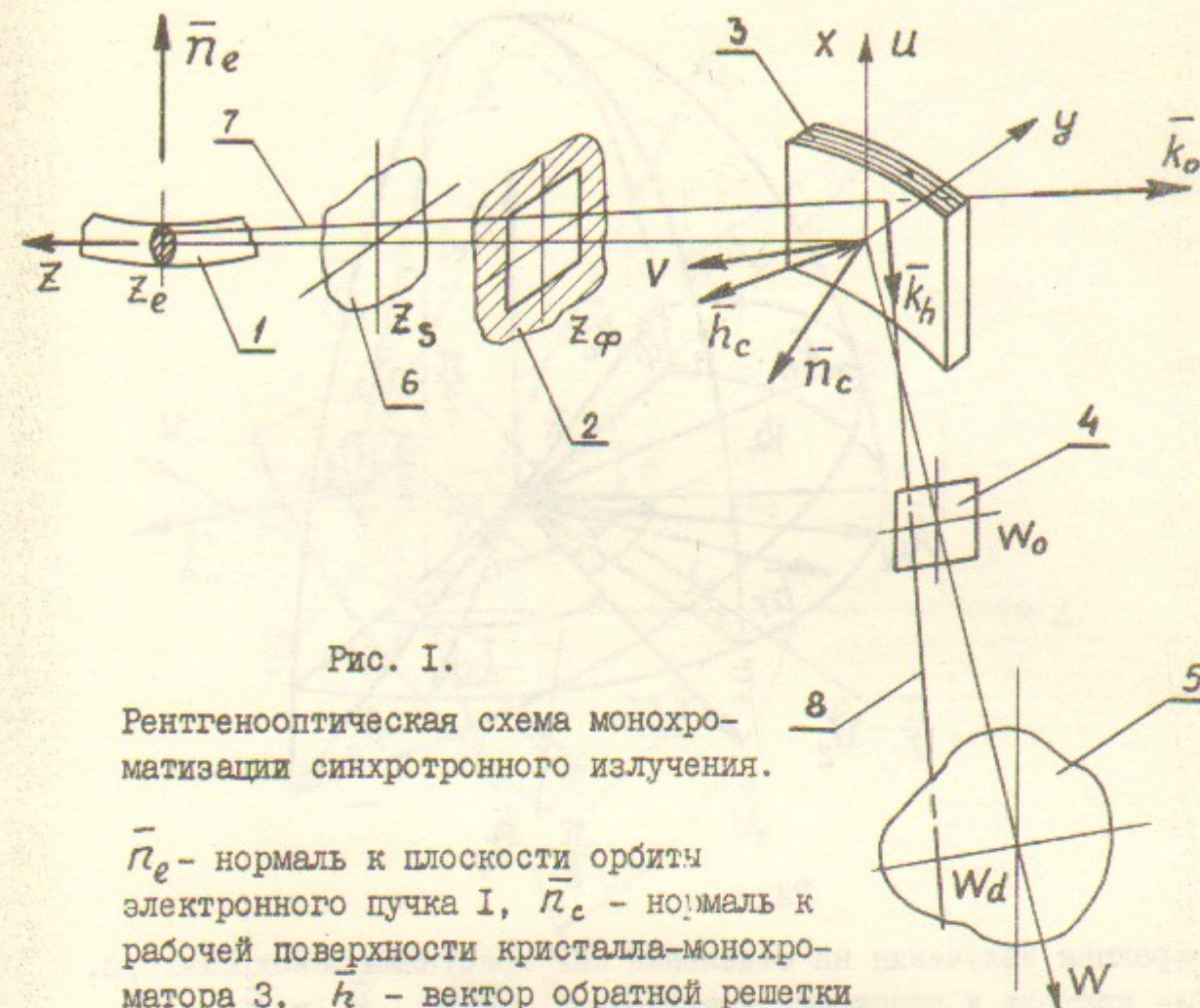


Рис. I.

Рентгенооптическая схема монохроматизации синхротронного излучения.

\vec{n}_e - нормаль к плоскости орбиты электронного пучка I, \vec{n}_c - нормаль к рабочей поверхности кристалла-монокроматора 3, \vec{h}_c - вектор обратной решетки системы отражающих плоскостей, \vec{k}_0 и \vec{k}_h - волновые вектора падающего 7 и связанного с ним дифрагированного 8 лучей соответственно. O - центр рабочей поверхности кристалла. O_z и O_w - центральные лучи падающего и дифрагированного параксиальных пучков СИ соответственно. Z_e, Z_ϕ, Z_s - координаты поперечных сечений электронного пучка-источника первичного пучка СИ, коллимационной системы 2 и виртуального источника 6, сопряженной плоскости регистрации, в правой системе координат O_{xyz}, W_0, W_d - координаты плоскости установки исследуемого объекта 4 и плоскости регистрации 5 в правой системе координат O_{uvw} .

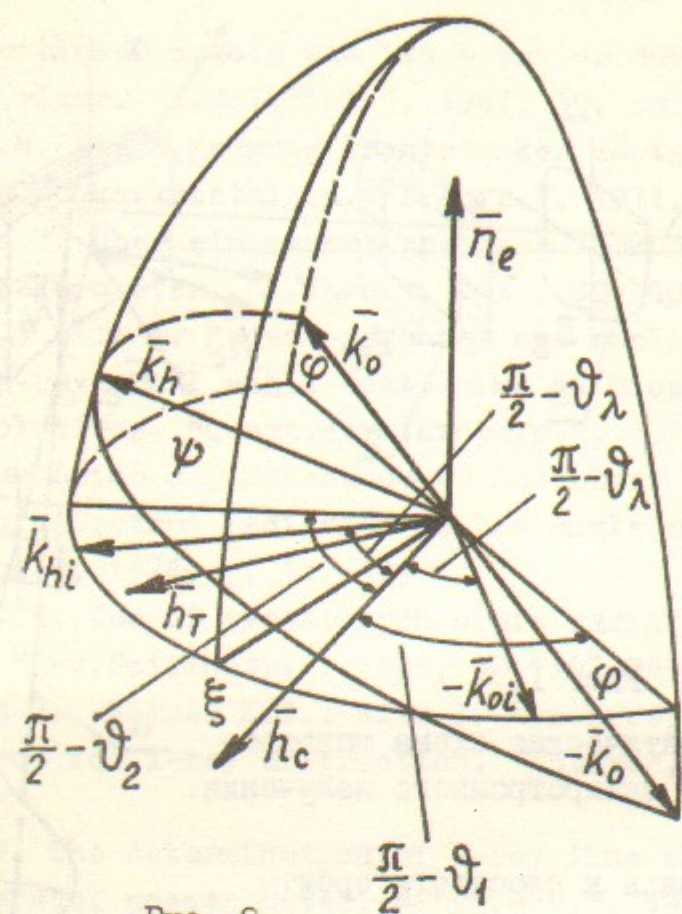


Рис. 2.

Дифракция излучения на отдельный ОКР кристалла монохроматора. \bar{n}_e - нормаль к плоскости электронной орбиты. \bar{k}_0 и \bar{k}_h - волновые вектора падающего на ОКР и связанного с ним дифрагированного лучей соответственно. - проекции на плоскость электронной орбиты углового отклонения волновых векторов соответственно от волновых векторов \bar{k}_{oi} и \bar{k}_{hi} , лежащих в плоскости электронной орбиты и соответствующих дифракции под углом Брэгга ϑ_λ для длины волны λ . φ и ψ - угловые отклонения падающего и связанного с ним дифрагированного лучей соответственно от плоскости электронной орбиты. ξ - проекция на горизонтальную плоскость углового отклонения вектора \bar{h}_T обратной решетки ОКР от усредненного вектора \bar{h}_c обратной решетки кристалла. ζ - угловое отклонение вектора обратной решетки ОКР от плоскости электронной орбиты. ϑ_1 и ϑ_2 - углы скольжения падающего и дифрагированного лучей соответственно к усредненной отражающей плоскости.

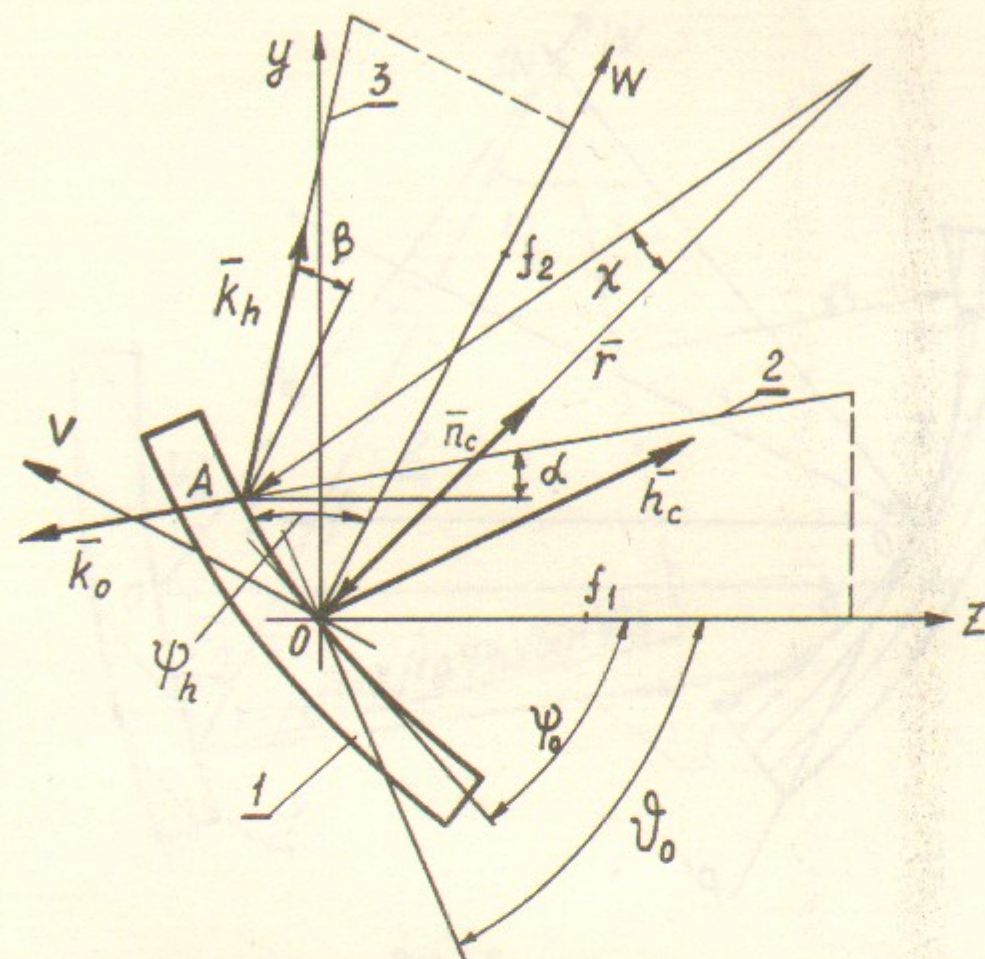


Рис. 3.

Проекция на горизонтальную плоскость хода лучей при дифракции на вогнутом кристалле-монохроматоре на отражение.

\bar{n}_c - нормаль к поверхности кристалла. \bar{h}_c - вектор обратной решетки системы отражающих плоск-й. \bar{r} - радиус кривизны кристалла, проведенный в центр 0. α, β - углы отклонения волновых векторов \bar{k}_0 и \bar{k}_h падающего 2 и связанного с ним дифракционного 3 лучей соответственно от осей O_z и O_w одноименных пучков. O_{yz} и O_{vw} - правые системы координат, выбранные как указано в тексте. ϑ_0 - угол Брэгга для длины волны λ_0 . ψ_0 и ψ_h - углы скольжения к поверхности кристалла падающего и дифрагированного лучей соответственно.

$f_1 = -\frac{1}{2} \bar{r} \bar{n}_z = \frac{1}{2} r \sin \psi_0$ и $f_2 = -\frac{1}{2} \bar{r} \bar{n}_w = \frac{1}{2} r \sin \psi_h$ - фокусные расстояния кристалла-монохроматора со стороны падающего и дифрагированного пучков соответственно. Луч, приходящий в точку A поверхности, отстоящую на дугу X от центра кристалла, выходит из точки $y = \alpha z + 2x f_1$ поперечного сечения первичного пучка и, дифрагировав, попадает в точку $v = \beta w + 2x f_2$ поперечного сечения W отраженного пучка.

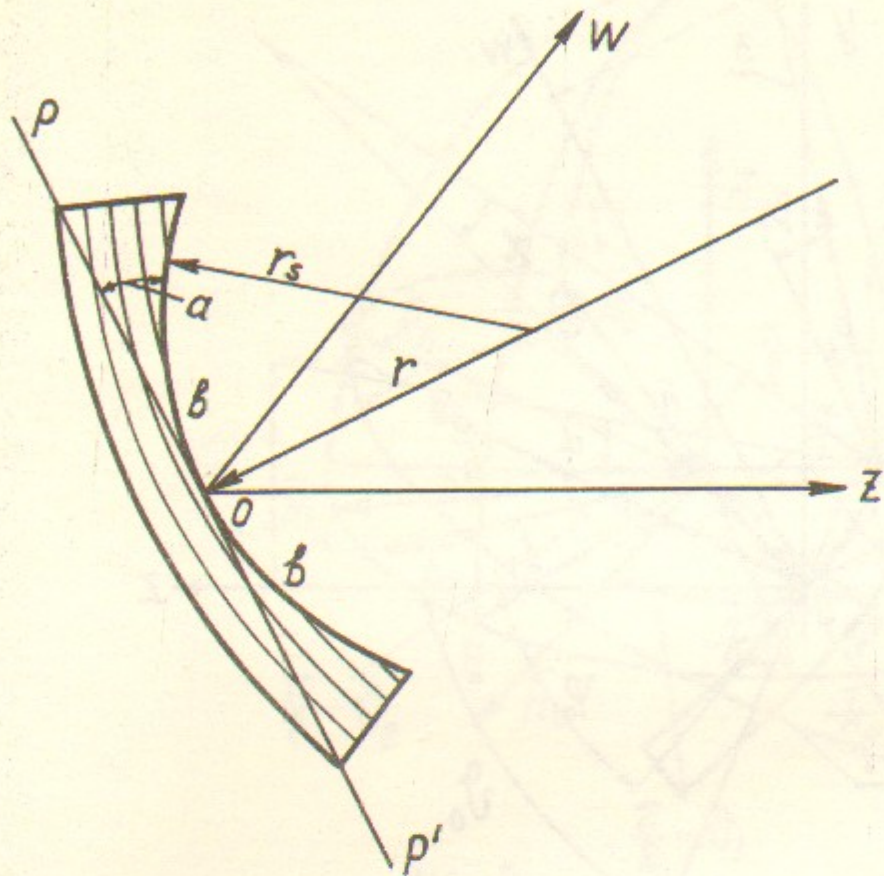


Рис. 4.

Кристалл-монокроматор на отражение по Иоганссону.

$O_z u O_w$ - оси падающего и дифрагированного пучков СИ соответственно.

r и r_s - радиус кривизны отражающих плоскостей и рабочей поверхности кристалла соответственно; $r_s = \frac{1}{2} r$. a - наибольшее отклонение облучаемой поверхности кристалла от плоскости PP' , касательной к поверхности в центре O кристалла. $2b$ - длина облучаемой поверхности кристалла.

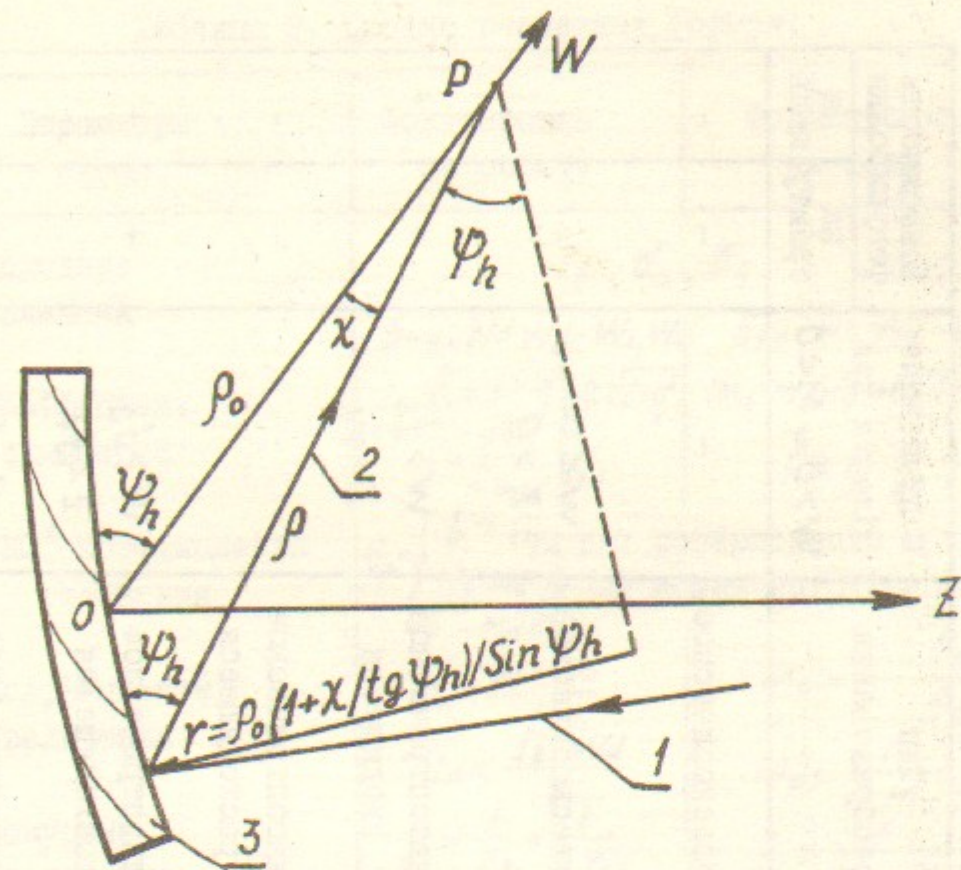


Рис. 5.

Кристалл-монокроматор с изгибом по логарифмической спирали 1 и 2 - падающий и связанный с ним дифрагированный лучи соответственно. O - центр кристалла 3, имеющий координаты $(\rho_0, 0)$ в полярной системе координат (ρ, χ) , в которой задана форма поверхности кристалла $\rho = \rho_0 \exp(\chi / \operatorname{tg} \psi_h)$. ψ_h - постоянный вдоль поверхности кристалла угол скольжения отраженных лучей, сходящихся в центре P полярной системы координат. $r = \rho_0(1 + \chi / \operatorname{tg} \psi_h) / \sin \psi_h$ - радиус кривизны кристалла в произвольной точке X его поверхности.

Таблица 1. Варианты схемы монохроматизации с различными типами кристаллов-монокроматоров

Тип кристалла	Схематическое изображение	Наименование	Знаки		Тип преобразования	Сопряженные области при $W > 0$ и $M < 0$	Возможность фокусировки	
			f_1	f_2			на орбиту	на щель
плоский на отражение		случай Брегга	+	-	телескопическое	-	-	-
							-	-
плоский на прохождение		случай Лауэ	+	+	катоптрическое сходящееся	-	$W < \infty$	+
							$Z > 0$	+
вогнутый на отражение		по Иоганну	+	-	катоптрическое расходящееся	-	$W > f_2$	-
							$Z > f_1$	-
выпуклый на отражение		по Дю-Монду	+	-	диоптрическое расходящееся	-	$W > f_2$	+
							$Z < f_1$	+
вогнутый на прохождение		по Кошуа	+	+	диоптрическое сходящееся	-	$W < f_2$	-
							$Z > f_1$	+

Таблица 2. Сводка расчетных формул.

№ п/п	Параметры схемы	Фокусировка на орбиту	Фокусировка на щель
1.	Исходные величины	$\Gamma_0, \beta_0, \beta_e$	
2.	Коэффициент асимметрии	$\beta_{TS}, N = W_d - W_0, W_d$ $\beta = 1 + q^2 + q\sqrt{2+q^2}$ $q = \frac{\Gamma_0}{2\beta_{TS}} \frac{N}{W_d}$	$\beta_{TS}, N = W_d - W_0, L = Z_e - Z_\phi$ $(M_0 - M_d)\Gamma_0 = (\beta^{-1} M_d)(\beta^{\frac{1}{2}} \beta^{-\frac{1}{2}})\beta_{TS}\sqrt{2}$ $\beta \geq 1$
3.	СКО* коэффициента отражения	$\beta_p = \begin{cases} \beta^{\frac{1}{2}} \beta_{TS} & \text{для совершенного кристалла} \\ \frac{M_0 - M_d}{\beta^{-1} M_d \sqrt{2}} \Gamma_0 & \text{для мозаичного кристалла} \end{cases}$	
4.	Коэффициенты увеличения	$M_0 = \frac{f_2 - W_0}{f_1}$ $M_d = \frac{f_2 - W_d}{f_1}$	$M_0 = -\frac{\beta_0}{\beta_e}$ $M_d = \frac{N}{LM_0\beta}$
5.	Фокусные расстояния	$\frac{1}{f_1} = \frac{1}{Z_e} + \frac{1}{\beta W_d}$ $\frac{1}{f_2} = \frac{\beta}{Z_e} + \frac{1}{W_d}$	$f_1 = \frac{N}{M_0 - M_d}$ $f_2 = \frac{N}{(M_0 - M_d)\beta}$
6.	Радиус кривизны	$r = \frac{2f_1}{\sin \psi_0} = \frac{2f_2}{\sin \psi_h}$	
7.	Расстояния от кристалла до: электронной орбиты щелевой диафрагмы образца плоскости регистрации	$Z_e = \frac{\beta_e \sqrt{2}}{\Gamma_0} \frac{W_d}{N}$ $Z_\phi = f_1 - f_2/M_0$ $W_0 = W_d - N$ W_d	$Z_e = f_1(1 - M_0^{-1}\beta^{-1})$ $Z_\phi = f_1(1 - M_d^{-1}\beta^{-1})$ $W_0 = f_2(1 - M_0\beta)$ $W_d = f_2(1 - M_d\beta)$
8.	СКО щелевой диафрагмы	$\beta_\phi = -\beta_0/M_0$ для $0 < Z_\phi < Z_e$	$\beta_\phi = \frac{\Gamma_0}{\sqrt{2}} LM_0\beta$

* Выражения для полуширин получаются заменой обозначения β на Ω

Таблица 3.

Параметры оптимальных вариантов рентгенооптической схемы с кристаллом-монохроматором по Иоганну.

№ п/п	Параметры	Фокусировка на орбиту	Фокусировка на цель
1	Размер образца, Ω_0 , мм	$2^{\#}$	
2	УРС схемы, Γ_{Ω} , угл.с.	$16^{\#}$	
3	Сечение электронного пучка, Ω_e , мм	$1,75^{\#}$	
4	Кристалл-монохроматор	Германий (III) полир. ^{##}	
5	Полуширина коэффициента отражения в симм. случае, Ω_{TS} , угл.с.	$16^{\#}$	
6	Коэффициент асимметрии, θ	2	$2^{\#}$
7	Размер камерн, $N=W_d-W_0$, м	$1^{\#}$	7
8	Расстояние от монохроматора до плоскости регистрации, W_d , м	$1,1^{\#}$	9,8
9	Расстояние от электронной орбиты до целевой диафрагмы, $L=Z_e-Z_p$, м	-	0,6
10	Расстояние от монохроматора до электронной орбиты, Z_e , м	37,9	$2,5^{\#}$
11	Фокусные расстояния, f_1 , м f_2 , м	$2,1$ $1,05$	$1,75$ $0,85$
12	Радиус кривизны, γ , м	14	11,6
13	Ширина щелевой диафрагмы, Ω_{ϕ} , мм	-	$0,075$

* Исходные данные

Таблица 4. Рентгенооптические свойства кристаллов-монохроматоров на излучении CuK_{α} .

№ п/п	Кристалл	Отраж. плоск.	Образ. поверхность	Коеф. асимм. θ	*** Интеграл. отраз.		СКО δ $\times 10^5$ рад	Полуширина Ω $\times 10^5$ рад	Кoeffициент * подавляемости		Г-е использов.	Примечание
					R_d	R_e			Σ^2	Σ^3		
1	кремний	(111)	полир.	1	3,88	3,83	25,1	6,36	0	$\frac{0,061}{0,23}$	A, Д, З	$\theta_T = \theta_P; \Omega_T = \Omega_P$
2	кремний	(111)	полир.	4	1,88	2,16	10,0	2,42	0	$\frac{0,061}{0,23}$	Б	"
3	кремний	(111)	полир.	0,25	7,53	7,57	41,6	10,6	0	$\frac{0,061}{0,23}$	В	"
4	германий	(111)	шлифов.	0,25	16,4	43,7	77,9	190	0	$\frac{0,068}{0,029}$	Г	$\theta_A = \theta_P; \Omega_A = \Omega_P$
5	графит	(0002)	скол	1	6,05	409	582	1160**	0,13	$\frac{0,047}{0,086}$	Е	"
6	кварц	(1011)	полир.	13	0,98	1,0	4,87	3,5	0,5	$\frac{7,0 \times 10^{-3}}{2,56 \times 10^{-2}}$	И	$\theta_T = \theta_P; \Omega_T = \Omega_P$

* Числитель в динамическом приближении, знаменатель - в кинематическом

** Среднее значение для графита по данным работы /3/

*** Определено по полуширине в предположении нормального закона распределения

**** Приведены значения: экспериментальное R_e , в динамическом R_d и кинематическом R_k приближениях

Таблица 5. Варианты геометрии рентгенооптической схемы.

Случай	Параметр, влияние которого проверяется по табл. 4	№ кристалла	Коэф. асимметрии	Радиус изгиба		Фокусные расстояния		Расст. от монохроматора до эл. детектора				Коэф. увел.	Ширина щели	Примечание
				r	r	f_1	f_2	Z_e	Z_ϕ	Wd	Z_s			
A	Размер щели	I	I	4,25	0,994	0,994	0,994	8,93	0,98	I,00	0,99	-I,0I	0,14	Монохроматич. фокус. на щель Полухроматич. фокус. вблизи элект. орбиты
B	Размер элект. пучка в гор. направлении	2	4,37	7,50	I,4I	0,323	0,323	8,93	4,46	0,37	II, I	-0,145	4	
B	Передаточная функция со-верш. крист.	3	0,229	3,14	0,135	0,59I	0,59I	8,93	4,46	0,60	5,78	-2,39 $\times 10^{-2}$	0,1	
Г	Передаточная функция мозаичного крист. в гор. напр.	4	0,228	3,15	0,13	0,57I	0,57I	8,07	3,60	0,59	4,13	-3,25 $\times 10^{-2}$	0,3	
Д	Вертикальная расходимость пучка СИ	I	I					8,97	0,25	0,25	-0,25	I	I,5	
Е	Передаточная функция мозаичного крист. в верт. напр.	5	I					8,97	0,25	0,25	-0,25	I	I,5	
Ж	Плоский кристалл, =	6	15,9					2,58	0,08	I,33	-2I, I	6,29	4	Изображен. мнимо- вирт. источ.
З	Фокусировка на $M=0$	I	I	8,5	0,994	0,994	0,994	8,93	0,98	0,98	-70, I	I,4 $\times 10^{-2}$	I	Изображен. мнимо- вирт. источ.

Таблица 6.

Относительные отклонения δ расчетных значений от экспериментальных (с подстрочным индексом e) и абсолютные величины Ω и других для потока W , проекции освещенности в максимуме E_{Ω} и полуширины Ω пучка дифрагированного излучения.

Случай	W	We	δW	E_{Ω}^*	E_{Ω}^*	E_e	δE_{Ω}	δE_e	$\delta \Omega$	δe	$\delta \Omega$	Ω	$\frac{\Omega_{e}}{\Omega}, \%$	R_e	$\delta \Omega$
A	0,167	0,209	20	1,64	1,06	1,07	I	-34	I	0,04I	100	0,142	100	0,203	30
B	20,6	17,7	-16	186	164	189	I3	2	I3	0,044	84	0,113	77	0,084	-34
B	I,44	I,77	18	13,5	15,4	18,6	17	28	17	0,043	65	0,084	59	0,07I	-12
Г	27,2	28,7	5	6,4I	10,9	7,96	-37	19	-37	0,17	100	0,224	100	0,265	16
Д	8,02	5,86	-37	2,4I	2,66	2,12	-14	-14	-25	I,33	100	2,7I	100	2,70	-0,5
Е	952	1200	20	26I	282	356	27	27	22	I,46	4I	3,04	46	3,14	4
Ж	5,15	4,23	-22	1,96	1,77	1,68	-17	-17	-5	I,05	-	2,59	-	2,18	-19
З	I,22	I,48	17	4,8	4,24	5,2	8	8	23	0,102	-	0,26	-	0,29	II

* E_{Ω} и E_e рассчитаны на основании SKO и полуширины соответственно.

** $\delta \Omega$ доля проверяемого параметра b_{ac} , Ω_{ac} в общей ширине распределения b, Ω .

Работа поступила - 16 июня 1977 г.

Ответственный за выпуск - С.Г.ПОПОВ

Подписано к печати 4.7-1977 г. МН 07453

Усл. 2,8 печ.л.; 2,4 учетно-изд.л.

Тираж 200 экз. Бесплатно

Заказ № 61.

Отпечатано на ротапринте ИЯФ СО АН СССР