

О применении совершенных кристаллов в рентгеновской спектроскопии высокого разрешения

А. В. Виноградов, Р. М. Фещенко¹⁾, В. А. Чернов⁺

Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН, 119991 Москва, Россия

⁺ Институт ядерной физики им. Г. И. Будкера Сибирского отделения РАН, 630090 Новосибирск, Россия

Поступила в редакцию 8 октября 2003 г.

Показана возможность увеличения разрешения и угловой дисперсии в рентгеновском диапазоне длин волн за счет применения асимметричных кристаллов в параллельных пучках.

PACS: 07.85.Fv, 41.50.+h, 61.10.-i

Высокое спектральное разрешение в рентгеновской области представляет интерес для исследований магнитных материалов (Co, Fe, Mn, Ge . . .) вблизи краев поглощения [1, 2], фононных спектров твердых тел при неупругом рентгеновском рассеянии [3], фотоядерных процессов [4] и т.п. Для его достижения широко применяются спектрометры и монохроматоры на основе плоских или изогнутых кристаллов, которые служат селективными отражателями в соответствии с условием Брэгга:

$$2d \sin(\varphi_0 + \alpha) = l\lambda_0, \quad l = 0, 1, 2, \dots, \quad (1)$$

где λ_0 – длина волны излучения, $\varphi_0 + \alpha$ – угол скольжения пучка относительно кристаллических плоскостей (см. рисунок), d – межплоскостное расстояние,

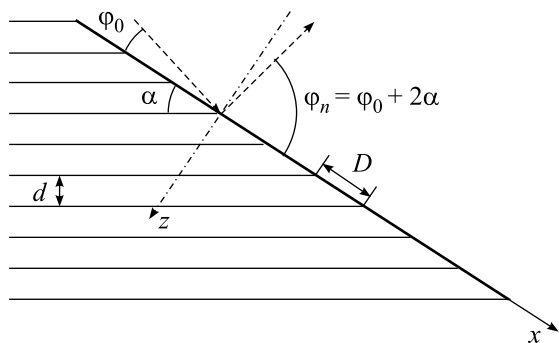


Схема отражения от асимметричного кристалла. Жирная линия – поверхность асимметричного кристалла; штриховая линия – траектория пучка; горизонтальные линии – атомные плоскости; φ_0 , φ_n , α – углы скольжения, дифракции и среза

индекс 0 там, где это не вызовет недоразумений, мы будем для краткости опускать. Кристалл может

быть симметричным (СК), если $\alpha = 0$, или асимметричным (АК), если $\alpha \neq 0$. В первом случае поверхность кристалла параллельна атомным плоскостям, а во втором образует с ними угол α (угол среза). Спектральное разрешение в обоих случаях определяется шириной кривой отражения, которая составляет обычно 10^{-3} – 10^{-6} рад [5]. Однако при отражении параллельного полихроматического пучка между СК и АК имеется одно отличие, представляющее интерес для спектроскопии. Действительно, полихроматический пучок отражается от поверхности СК зеркально, то есть без разложения в спектр. В то же время, отражаясь от АК, пучок разлагается в спектр, поскольку АК в отличие от СК является дифракционной решеткой с периодом $D = d/\sin \alpha$. Разрешающая способность такой решетки определяется, очевидно, полным числом периодов $N = L/D$ и ограничивается лишь размером кристалла L либо технологическими возможностями (в этом случае N – число сфазированных атомных плоскостей). Ширина же кривой отражения (которая для СК определяет спектральное разрешение) в случае АК, используемого в качестве дифракционной решетки, определяет область дисперсии, то есть спектральную область, где эффективность дифракции велика.

Таким образом, АК представляет собой дифракционную решетку с: а) большой дисперсией (благодаря малости периода D); б) высокой дифракционной эффективностью (благодаря эффекту Брэгга) в узкой спектральной области, положение которой определяется условием (1), и в) высоким спектральным разрешением, соответствующим числу атомных плоскостей N , выходящих на поверхность. Количественное описание упомянутых свойств следует из решения задачи дифракции на АК. Рассмотрим кристалл, для которого при каком-то l выполнено условие (1). Убедимся вначале, что для АК условие Брэгга совпада-

¹⁾e-mail: rusl@sci.lebedev.ru

Ширины дифракционных пиков для ряда асимметричных кристаллов (угол среза $\alpha = 10^\circ$)

Кристалл	Si			Ge			CaF ₂	
	(422)	(220)	(111)	(422)	(220)	(111)	(220)	(111)
Индексы Миллера	(422)	(220)	(111)	(422)	(220)	(111)	(220)	(111)
2d, нм	0.222	0.384	0.627	0.231	0.400	0.653	0.386	0.631
λ , нм	0.194	0.166	0.275	0.179	0.131	0.607	0.166	0.275
Φ , нм	60.9	25.6	26.0	50.8	19.1	68.4	25.6	26.0
Ω , мрад	0.028	0.030	0.069	0.046	0.052	0.765	0.040	0.040
$\Delta\lambda/\lambda \cdot 10^5$	1.64	8.62	19.46	4.10	24.64	30.68	11.65	11.52
$\delta\varphi$, мрад	0.005	0.022	0.050	0.013	0.058	0.101	0.030	0.030

ет с уравнением решетки. Для этого введем в (1) вместо параметров многослойной структуры d и α параметры $D = d/\sin \alpha$ и $\varphi_n = \varphi + 2\alpha$, характеризующие решетку. Действительно, получаем уравнение решетки:

$$D(\cos \varphi_n - \cos \varphi) = n\lambda_0, \quad (2)$$

где $n = -l$. То есть луч, зеркально отраженный от атомных плоскостей, соответствует (l)-му порядку дифракции на решетке, образованной АК. Поэтому именно в этом порядке следует ожидать высокую дифракционную эффективность. Итак, рассмотрим полихроматический пучок с углом скольжения φ , причем условие (1) выполнено для всех длин волн пучка приближенно, а для $\lambda = \lambda_0$ — строго. Пользуясь приближением медленных амплитуд, при условии сильной связи нулевого и n -го порядков дифракции можно получить следующие выражения для поля вне и внутри АК:

$$z < 0, \quad E(x, z) = \exp\{ikx \cos \varphi + ikz \sin \varphi\} + R_n \exp\{ikx \cos \varphi_n - ikz \sin \varphi_n\}, \quad (3)$$

$$z > 0, \quad E(x, z) = \exp\{i(\omega_0 - \omega_n)(z/2) - \nu z\} \times (\exp\{ikx \cos \varphi + iz\zeta_0\} + R_n \exp\{ikx \cos \varphi_n - iz\zeta_n\}), \quad (4)$$

где

$$\omega_m = \frac{k^2[\varepsilon_0 - \cos^2 \varphi_m] - \zeta_m^2}{2\zeta_m}, \quad m = 0, n; \quad (5)$$

$$\zeta_0 = \frac{2\pi n \cos \alpha \sin \varphi_0}{d(\sin \varphi_0 + \sin \varphi_n)}, \quad \zeta_n = \zeta_0 \frac{\sin \varphi_n}{\sin \varphi_0},$$

$$\nu = \sqrt{\frac{k^4 B_n^2}{\zeta_0 \zeta_n} - \frac{(\omega_0 + \omega_n)^2}{4}},$$

$$R_n = \frac{-k^2 B_n}{\zeta_0[(\omega_0 + \omega_n)/2 + i\nu]};$$

$k = 2\pi/\lambda$, φ_n — определен в (2), а ε_0 — средняя диэлектрическая проницаемость кристалла. Согласно (3)–(5), амплитуда дифрагированной волны R_n в отсутствие поглощения и при $\varepsilon_0 \approx 1$ зависит лишь от одной

(не считая d) материальной константы B_n , которая представляет собой фурье-гармонику разложения диэлектрической проницаемости кристалла. Она может быть выражена через брэгговский угол $\Phi = \varphi + \alpha$ и полуширину кривой отражения СК, таблицы которых для ряда кристаллов приведены в [5]:

$$B_n = \frac{\Omega}{3\sqrt{2}} \sin 2\Phi. \quad (6)$$

Легко убедиться, что в области длин волн, где подкоренное выражение в (5) положительно, эффективность дифракции, определяемой как $\eta_n = |R_n|^2 \sin \varphi_n / \sin \varphi_0$, равна 1. Ширина этой области равна

$$\frac{\Delta\lambda}{\lambda} = \frac{2\sqrt{2}}{3} \frac{\Omega}{\text{tg}\Phi} \sqrt{\frac{\sin(\Phi + \alpha)}{\sin(\Phi - \alpha)}}. \quad (7)$$

Это и есть область дисперсии (рабочая область) АК. Угловая дисперсия в соответствии с уравнением решетки (2) равна

$$\frac{d\varphi_n}{d\lambda} = -\frac{n \sin \alpha}{d \sin \varphi_n} \quad \text{или} \quad \lambda \frac{d\varphi_n}{d\lambda} = \frac{2 \sin \Phi \sin \alpha}{\sin(\Phi + \alpha)}. \quad (8)$$

В отличие от (8) угловая дисперсия нарезных или голографических рентгеновских решеток содержит малый множитель $\sim (\lambda/a)$, где a — период решетки.

С помощью таблицы можно определить спектральные интервалы $(\lambda - \Delta\lambda/2, \lambda + \Delta\lambda/2)$, в которых различные кристаллы могут быть использованы в качестве дисперсионных элементов с эффективностью, близкой к 100%. В ней указаны параметры d и Ω некоторых кристаллов, брэгговский угол Φ , угол среза α , а также спектральная, $\Delta\lambda/\lambda$, и угловая ширина $\delta\varphi_n$ рабочей области, определенные согласно (7) и (8).

Значительно большее значение $\Omega \approx 10$ мрад по сравнению с данными таблицы имеет кристалл пирографита. Для него естественно ожидать и более широкой рабочей области, $\Delta\lambda/\lambda \sim \Omega \approx 10^{-2}$, несмотря на то, что теория (2)–(8) в этом случае, строго

говоря, не применима в силу известных особенностей строения пирографита [6]. По той же причине и спектральное разрешение ограничено размером доменов, а не полным размером образца L .

Отметим в заключение, что в случае совершенных кристаллов для получения спектрального разрешения $\lambda/\delta\lambda \sim 10^7$, в принципе, достаточно использовать образцы размером $L \sim (\lambda/\delta\lambda)D \approx 1$ см. Таким образом, спектральное разрешение и угловая дисперсия в рентгеновской спектроскопии могут быть существенно увеличены, если использовать АК в качестве дифракционной решетки с периодом, соответствующим межплоскостному расстоянию и углу среза. Такой подход может быть альтернативой многокристалльным монохроматорам и спектрометрам с дифракционными решетками, в которых СК или АК используются в качестве селективных отражателей [1, 7, 8].

Авторы благодарны И. А. Артюкову, И. А. Житнику, В. Е. Дмитриенко, В. А. Бушуеву и А. Г. Турьянскому за полезные замечания. Работа поддержива-

лась грантами Российского фонда фундаментальных исследований # 03-02-16438, CRDF# RP-2-2326-MO-02 и МНТЦ # 1794.

1. K. Gerard, SRN **10**, 26 (1997).
2. Bu Hu, P. Geissbuhler, L. Sorensen et al., SRN **14**, 11 (2001).
3. K. Hamalainen and S. Manninen, J. Phys. Condens. Matter **13**, 7539 (2001).
4. C. B. Collins, F. Davanloo, M. C. Iosif et al., Phys. Rev. Lett. **82**, 695 (1999).
5. B. L. Henke, E. M. Gullikson, and J. C. Davis, At. Data Nucl. Data Tables **54**, 181 (1993).
6. R. Beckhoff, B. Kanngiesser, and W. Malzer, Proc. SPIE **2859**, 190 (1996).
7. З. Г. Пинскер, *Рентгеновская кристаллооптика*, М.: Наука, 1982.
8. А. И. Чумаков, Р. Рюфер, Й. Метже, А. Барла, Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования **1**, 42 (2000).